

ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В.Н.КАРАЗІНА
МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»
НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Наумовець Артем Сергійович

УДК 536.2.01, 534-141

ДИСЕРТАЦІЯ
ОПИС ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІВ ТА
НАДПЛИННОГО ГЕЛЮ З УРАХУВАННЯМ ЗОВНІШНІХ ПОЛІВ ТА
ВЗАЄМОДІЇ КВАЗІЧАСТИНОК

01.04.02 – теоретична фізика

Фізико-математичні науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ А.С.Наумовець

Науковий керівник – **Ходусов Валерій Дмитрович**, доктор фізико-математичних наук, професор

Харків – 2021

АНОТАЦІЯ

Наумовець А.С. Опис термодинамічних властивостей кристалів та надплинного гелію з урахуванням зовнішніх полів та взаємодії квазічастинок. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за фахом 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна МОН України – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Харків, 2021.

Дисертаційна робота присвячена теоретичним дослідженням поведінки квазічастинкових систем в твердих тілах, а також у надплинному гелію за наявності зовнішнього електричного поля.

Однією з основних моделей побудування сучасної теорії слабозбуджених станів конденсованих середовищ є квазічастинкова модель, в якій всі макроскопічні властивості середовища повністю визначаються мікроскопічними властивостями газу теплових квазічастинок – фононів, ротонів, магнонів тощо. Опис коливань кристалічної ґратки за допомогою моделі газу невзаємодіючих фононів є вдалим прикладом. В той же час, в області високих темпер густина фононів виявляється значною і може перевищувати густину частинок середовища, а отже, взаємодія між фононами стає більш істотною. Як наслідок, для адекватного опису нелінійних властивостей середовища потрібна узагальнена модель Дебая, яка містить тензори модулів пружності третього і четвертого порядку. Для кристала довільної симетрії останній має більше шести тисяч елементів, з яких (для найбільш несиметричних кристалів триклинної кристалічної системи) 126 є незалежними. В дисертаційній роботі продемонстровано спосіб зведення опису пружних властивостей кристалів довільної симетрії до властивостей ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів. Здобуто модулі пружності четвертого рангу цього середовища. Побудована дев'ятиконстантна модель опису твердого тіла. На основі розробленої

теоретичної моделі розраховано величину параметра анізотропії кристалічної ґратки для різних речовин кубічної кристалічної системи. Виявлено різний характер поведінки теплоємності за високих температур в залежності від знаку параметра анізотропії. При додатних значеннях параметра анізотропії ізохорична теплоємність уточнюється від'ємним лінійним за температурою доданком, тобто відхиляється від закону Дюлонга-Пті, спадає з ростом температури. Така поведінка є характерною для більшості речовин кубічної кристалічної системи. Для речовин з ґраткою типа алмазу параметр анізотропії виявляється від'ємним, що відповідає лінійному зростанню ізохоричної теплоємності кристала з ростом температури. Така поведінка теплоємності спостерігається в експериментах.

В області низьких температур в газі фононів кристалічної ґратки встановлюється гідродинамічний режим, коефіцієнт теплопровідності має максимум. Відкривається можливість поширенню слабо-загасаючих теплових хвиль. У дисертаційній роботі наведено спосіб розрахунку області існування хвиль другого звуку в кристалах в моделі зведення пружних властивостей кристала до ізотропного середовища. На основі розробленого підходу розраховано область існування теплових хвиль в ізотопічно збіднених кристалах алмазу та фториду літію. Для уточнення температурних границь області існування хвиль другого звуку для цих речовин аналогічні розрахунки проведені за модифікованою моделлю Калавея для кристалів з кінцевими розмірами. Результати розрахунків за двома моделями знаходяться в узгодженні. Визначено внески до часу життя фонона кристалічної ґратки від нормальних процесів, процесів перекидання, зіткнень з ізотопами та границею твердого тіла. Розглянуто випадок, коли переважають нормальні процеси.

В новітніх експериментах з надплинним гелієм спостерігалася електрична активність. А саме при поширенні хвиль другого звуку крізь об'єм He-II виникала електрична різниця потенціалів на стінках резонатора, що коливалася з фіксованою різницею фаз від фази звуку. При цьому в

нормальному стані гелію, а також в хвилі першого звуку, виникнення електричної різниці потенціалів не спостерігалось. Таким чином, прояв електричної активності гелію міг виявитися пов'язаним з природою виникнення надплинності. Експерименти по збудженню другого звуку електричним полем в He-II проводилися при температурах $1,4 \div 1,8$ К. У цій області температур газ ротонів грає основну роль в термодинамічних і кінетичних властивостях надплинного гелію. За рахунок швидких процесів ротон-ротонної взаємодії встановлюється гідродинамічний режим, який описується рівняннями дворідинної гідродинаміки. Зробивши єдине припущення про існування дипольного моменту ротонів, в дисертаційній роботі знайдено систему рівнянь дворідинної гідродинаміки надплинного гелію з урахуванням зовнішнього електричного поля. Це узагальнює дворідинну гідродинаміку і дає змогу з єдиної точки зору пояснити експерименти з поглинання НВЧ хвиль надплинним гелієм та генерацію хвиль другого звуку змінним низькочастотним електричним полем.

Проведено аналіз розв'язків системи лінійних рівнянь дворідинної гідродинаміки з урахуванням зовнішнього електричного поля. Визначено, що, як у хвилі першого, так і другого звуку коливання зазнають такі величини: температура, тиск (густина), швидкості, електричне поле, фур'є-компоненти яких пов'язані між собою. Показано, що в силу малості коефіцієнту об'ємного теплового розширення та малості зв'язку електричного поля з полем тиску збудження першого звуку електричним полем виявляється неефективним. Тому в експериментах зі збудження першого звуку не була зареєстрована електрична складова коливань. В хвилі другого звуку температурне і електричне поле сильно пов'язані між собою, тому при тепловому збудженні хвиль другого звуку спостерігається змінне електричне поле, і стає зрозумілою можливість резонансного збудження хвиль другого звуку електричним полем.

У дисертаційній роботі доведено, що при русі надплинної складової

⁴Не стосовно системи квазічастинок надплинного гелію виникає електричне

поле, обумовлене електричними властивостями квазічастинок гелію – ротонами. Обчислено вектор поляризації, обумовлений анізотропним розподілом дипольних моментів ротонів. Знайдені залежності різниці потенціалів від температури і відносної швидкості руху узгоджуються з експериментальними даними.

Серед основних результатів і таких, що мають наукову новизну, в стислому вигляді можуть бути виділені наступні. Здобуто модулі пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів. Побудована дев'ятиконстантна модель опису твердого тіла, яка враховує нелінійні трьох- та чотирьохфононні взаємодії. Розраховано параметр анізотропії кристалічної ґратки, який характеризує взаємодію фононів між собою, для різних речовин кубічної кристалічної системи. Розраховано відхилення теплоємності твердих тіл за високих температур в залежності від знаку параметра анізотропії для кристалів кубічної кристалічної системи. Розраховано області існування хвиль другого звуку в кристалах алмазу та фториду літія. Визначено внески до часу життя фонона кристалічної ґратки від нормальних процесів, процесів перекидання, зіткнень з ізотопами та границею твердого тіла. Розглянуто випадок, коли переважають нормальні процеси. Знайдено систему рівнянь дворідинної гідродинаміки надплинного гелію з урахуванням зовнішнього електричного поля. Доведено, що при русі надплинної складової He-II відносно системи квазічастинок надплинного гелію виникає електричне поле, обумовлене електричними властивостями квазічастинок гелію – ротонами. Результати розрахунків порівнюються з експериментальними даними. Обчислено вектор поляризації, обумовлений дипольними моментами ротонів. Здобуто явний аналітичний вираз для електричної різниці потенціалів, що виникає при відносному русі нормальної і надплинної складових гелію у циліндричному резонаторі хвиль другого звуку. Знайдений середній дипольний момент ротона узгоджуються з експериментальними даними.

Результати роботи мають фундаментальний характер і формують низку

нових фундаментальних знань про процеси взаємодії теплових фононів між собою, з домішками та із зовнішніми полями, а також, про електричні властивості надплинного гелію. Визначені в роботі співвідношення концентрації ізотопів, розміру кристала та температури, за яких є можливим розповсюдження хвиль другого звуку, надають додаткові фізичні методи виміру ізотопічного складу речовини. Теоретичне пояснення відхилення ізохоричної теплоємності кристала за високих температур від закону Дюлонга-Пті робить можливим розробку високочутливих методів нелінійної діагностики, що ґрунтуються на вимірі цієї величини. Методика зведення опису кристала до ізотропного середовища, як і самі розраховані модулі пружності четвертого рангу, має суттєве теоретичне значення, оскільки вона спрощує спосіб знаходження оцінок нелінійних ефектів у твердих тілах. Використання моделі квазічастинок в дисертаційній роботі дало змогу пояснити особливості явищ, які спостерігалися в експерименті, що підтвердило справедливість цієї моделі для опису широкого класу властивостей квантових суцільних середовищ – від теплових до електричних. Це дає змогу вважати модель квазічастинок надійним інструментом для подальшого розвитку теорії квантових рідин. Гіпотеза існування дипольного моменту ротона, що знайшла підтвердження у дисертаційній роботі, дає змогу дати рекомендації щодо проведення нових експериментів з дослідження електричної активності надплинного гелію.

Ключові слова: теплоємність твердих тіл, надплинний гелій, температура Дебая, ротони, процеси вирівнювання, швидкості нормальної та надплинної складових, взаємодія фононів, поляризація гелію.

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Ходусов В.Д., Наумовец А.С. Уравнения двухжидкостной гидродинамики сверхтекучего гелия с учетом электрического поля. *Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Серія фізична «Ядра, частинки, поля»*. 2010. Вип. 2, № 899. С. 44–49. <http://dspace.univer.kharkov.ua/handle/123456789/4729>
2. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Second sound waves in diamond. *Diamond and Related Materials*. 2012. Vol. 21. P. 92 – 98. (квартиль Q2) doi: 10.1016/j.diamond.2011.10.005
3. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the effect of superfluid flows on the interaction of microwaves with He II. *Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 15, №4. P. 43601. (квартиль Q3) doi:10.5488/CMP.15.43601
4. Khodusov V.D, Naumovets A.S. About conditions of existence of second sound waves in isotropically enriched crystals ^7LiF . *East European Journal of Physics*. 2015. Vol. 2, № 2. P. 59 – 64. doi:10.26565/2312-4334-2015-2-07
5. Burlayenko O., Khodusov V., Naumovets A. Reduced isotropic crystal model with respect to the fourth-order elastic moduli. *East European Journal of Physics*. 2018. Vol.5, № 1. P. 70 – 73. doi:10.26565/2312-4334-2018-1-08
6. Naumovets A.S., Poluektov Yu.M., Khodusov V.D. Nonlinear Effects in the Phonon System of Diamond Crystal. *East European Journal of Physics*. 2020. № 2. P. 124 – 135. doi:10.26565/2312-4334-2020-2-12

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

7. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Interaction of electromagnetic waves with superfluid helium. *International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2010: Book of abstracts* (Kyiv, Ukraine, May 21-24, 2010). Kyiv, 2010. P. 327.

8. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Features of interaction of microwaves with He-II. *International Symposium on Quantum Fluids and Solids 2010*: Book of abstracts (Grenoble, France, August 1-7, 2010). Grenoble, 2010. P. 32.
9. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About absorption of low-frequency electromagnetic waves in superfluid helium. *3rd International Conference Quantum Electrodynamics and Statistical Physics*: Book of abstracts (Kharkov, Ukraine, August 29 - September 2, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.
10. Naumovets A. S., Khodusov V. D. The absorption of the variable electric field in superfluid helium by the Akhiezer mechanism. *3rd International Conference Quantum Electrodynamics and Statistical Physics*: Problems of atomic science and technology. Series: Nuclear Physics Investigation. 2012. Vol. 57, № 1. P. 296–298. (квартиль Q3)
11. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About influence of the superfluid flows on interaction of SHF waves with He. *4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications*: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3-6, 2012). Lviv, 2012. P. 120.
12. Naumovets A.S. Resonant Absorption in Superfluid Helium. *Young scientists conference "Problems of Theoretical Physics"*: Book of abstracts (Kyiv, Ukraine. December 24-27, 2013). Kyiv, 2013. P. 23.
13. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the possibility of excitation of microwaves by a heat flows in the superfluid helium. *6-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2014*: Book of abstracts (Kyiv, Ukraine, May 23-27, 2014). Kyiv, 2014. P. 158.
14. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Microwaves radiation by roton streams in superfluid helium. *International Conference on Quantum Fluids and Solids 2016*: Book of abstracts (Prague, Czech Republic, August 10-16, 2016). Prague, 2016. P. 96.
15. Наумовець А.С., Полукетов Ю.М., Ходусов В.Д. Термодинамика взаємодіючих самоузгоджених фононів в кристалах. *XIII Міжнародна*

наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах»: Збірка тез (Харків, Україна 5-8 грудня, 2017). Харків, 2017. С. 33.

16. Наумовець А.С., Полукетов Ю.М., Ходусов В.Д. Nonlinear effects in the phonon system of diamond crystal. *XIV Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах»: Збірка тез* (Харків, Україна, 3-5 грудня, 2019). Харків, 2019. С.58.

ABSTRACT

Naumovets A.S. Description of thermodynamic properties of crystals and superfluid helium taking into account external fields and interaction of quasiparticles. – Qualifying scientific paper, manuscript copyright.

Thesis for a candidate's degree in physics and mathematics: speciality 01.04.02 "Theoretical physics" (104 - Physics and Astronomy) – Karazin Kharkiv National University, Ministry of Education and Science of Ukraine, – National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology" NAS of Ukraine, Kharkiv, 2021.

The thesis is devoted to the theoretical research of the behavior of quasiparticle systems in solids in the region of high and low temperatures, as well as in superfluid helium in the presence of an external electric field.

A quasiparticle model occupies an important place in the framework of theory of weakly excited states of condensed media. In this model all macroscopic properties of the medium are completely determined by the microscopic properties of the gas of thermal quasiparticles – phonons, rotons, magnons, etc. The description of the oscillations of the crystal lattice using the gas model of non-interacting phonons is a good example. At the same time, in the region of high temperatures, the density of phonons is significant and it can exceed the density of particles in the medium, and therefore, the interaction between phonons becomes more significant. As a result, a generalized Debye model is needed for description of nonlinear properties of the medium. It operates with tensors of third- and fourth-order modulus of elasticity, which have up to six thousand elements. 126 of them are independent for the most asymmetric crystals of a triclinic crystal system. A method of reducing the description of the elastic properties of crystals of arbitrary symmetry to the properties of an isotropic medium equivalent to real crystals is provided in the present thesis. Modules of elasticity of the fourth rank of this medium are obtained. A nine-constant model of the description of a solid body is constructed. Based on the developed theoretical model, the value of the crystal lattice anisotropy parameter for different substances of the cubic crystal system is

calculated. The different types of the heat capacity behavior at high temperatures depending on the sign of the anisotropy parameter is revealed. At positive values of the anisotropy parameter the isochoric heat capacity deviates from the Dulong-Petit law and decreases when temperature increases. This behavior is characteristic of most substances of the cubic crystal system. The anisotropy parameter is negative for substances with a lattice of diamond-type. It leads to linear increasing of the isochoric heat capacity with temperature. This behavior of heat capacity is observed in experiments.

In the region of low temperatures in the phonon gas of the crystal lattice, a hydrodynamic regime is established, and the thermal conductivity coefficient has a maximum. The possibility of propagation of weakly attenuating heat waves opens up. The method of calculation of the region of existence of waves of the second sound in crystals in model of reduction of elastic properties of crystal to isotropic environment is resulted in this thesis. Based on the developed approach, the region of existence of heat waves in isotopically depleted crystals of diamond and lithium fluoride is calculated. To clarify the temperature limits of the region of existence of the second sound waves for these substances, similar calculations were performed according to a modified Callaway model for crystals with finite dimensions. The results of calculations for the two models are in agreement. The contributions to the lifetime of the crystal lattice phonon from normal processes, overturning processes, collisions with isotopes and the boundary of a solid are determined. The case when normal processes prevail is considered.

In recent experiments with superfluid helium, electrical activity was observed. Namely, when the waves of the second sound propagated through the volume of He-II, an electric potential difference occurred on the walls of the resonator, which fluctuated with a fixed phase difference from the sound phase. In the normal state of helium, as well as in the wave of the first sound, the occurrence of an electric potential difference was not observed. Thus, the electrical activity of helium may be related to the nature of the superfluid. Experiments on the excitation of the second sound by an electric field in He-II were performed at

temperatures of $1.4\div 1.8$ K. In this temperature range, roton gas plays a major role in the thermodynamic and kinetic properties of superfluid helium. Due to the rapid processes of roton-roton interactions, a hydrodynamic regime is established, which is described by the equations of two-liquid hydrodynamics. Having made a single assumption about the existence of the dipole moment of rotons, the system of equations of two-liquid hydrodynamics of superfluid helium taking into account the external electric field is found in the dissertation work. This generalizes two-liquid hydrodynamics, and makes it possible to explain, from a single point of view, experiments on the absorption of microwave waves by superfluid helium and the generation of second-sound waves by alternating low-frequency electric.

The solutions of the system of linear equations of two-liquid hydrodynamics taking into account the external electric field are analyzed. It is determined that in both the wave of the first and the second sound the oscillations undergo the following values: temperature, pressure (density), velocities, electric field, the Fourier components of which are interconnected. It is shown that due to the small coefficient of volumetric thermal expansion and the small connection of the electric field with the pressure field, the excitation of the first sound by the electric field is ineffective. Therefore, in the experiments on the excitation of the first sound, no electrical component of the oscillations was registered. In a wave of the second sound, the temperature and the electric field are strongly interconnected, so when the thermal excitation of the waves of the second sound, an alternating electric field is observed, and the possibility of resonant excitation of the waves of the second sound by an electric field becomes clear.

In the present work it is proved that during the motion of the superfluid component ^4He with respect to the system of quasiparticles of helium an electric field arises due to the electrical properties of helium quasiparticles – rotons. The polarization vector due to the anisotropic distribution of dipole moments of rotons is calculated. The dependences of the potential difference on temperature and relative velocity are consistent with the experimental data.

Among the main results and those that have scientific novelty, in summary can be identified as follows. The modulus of elasticity of the fourth rank of an isotropic medium equivalent to real crystals is obtained. A nine-constant model of the description of a solid body is constructed, which takes into account nonlinear three- and four-phonon interactions. The anisotropy parameter of the crystal lattice, which characterizes the interaction of phonons with each other, for different substances of the cubic crystal system is calculated. The deviation of heat capacity of solids at high temperatures depending on the sign of the anisotropy parameter for crystals of a cubic crystal system is calculated. The regions of existence of the second sound waves in diamond and lithium fluoride crystals are calculated. The contributions to the lifetime of the crystal lattice phonon from normal processes, overturning processes, collisions with isotopes and the boundary of a solid are determined. The case when normal processes prevail is considered. A system of equations of two-liquid hydrodynamics of superfluid helium taking into account the external electric field is found. It is proved that during the motion of the superfluid component He-II with respect to the system of quasiparticles of superfluid helium, an electric field arises due to the electrical properties of helium quasiparticles - rotons. The results of the calculations are compared with experimental data. The polarization vector due to the dipole moments of the rotons is calculated. An explicit analytical expression is obtained for the electric potential difference that arises during the relative motion of the normal and superfluid components of helium in a cylindrical resonator of the second sound waves. The found average dipole moment of the roton is consistent with the experimental data.

The results of the work are fundamental and form a number of new fundamental knowledge about the processes of interaction of thermal phonons with each other, with impurities and with external fields, as well as about the electrical properties of superfluid helium. Determining the ratio of isotope concentration, crystal size and temperature at which the propagation of second sound waves is possible, provide additional physical methods for measuring the isotopic composition of matter. A theoretical explanation of the deviation of the isochoric

heat capacity of a crystal at high temperatures from the Dulong-Petit law makes it possible to develop highly sensitive methods of nonlinear diagnostics based on the measurement of this quantity. The method of reducing the description of a crystal to an isotropic medium, as well as the calculated modulus of elasticity of the fourth rank, is of significant theoretical importance because it simplifies the method of finding estimates of nonlinear effects in solids. The use of the model of quasiparticles in the dissertation made it possible to explain the features of the phenomena observed in the experiment, which confirmed the validity of this model to describe a wide class of properties of quantum solid media - from thermal to electrical. This makes it possible to consider the quasiparticle model as a reliable tool for the further development of the theory of quantum fluids. The hypothesis of the existence of the dipole moment of the roton, which was confirmed in the dissertation, allows to give recommendations for new experiments on the experiment of electrical activity of superfluid helium.

Keywords: heat capacity of solid, superfluid helium, Debye temperature, roton, relaxation processes, velocities of normal and superfluid component, interconnection of phonons, polarization of helium.

ЗМІСТ

ЗМІСТ	15
ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ І АБРЕВІАТУР	17
ВСТУП	18
РОЗДІЛ 1 ГАЗОДИНАМІЧНА ТЕОРІЯ БОЗЕ-КВАЗІЧАСТИНОК (ОГЛЯД).....	25
1.1. Квазічастинкові системи	25
1.2. Вторинні хвилі в газі бозе-квазічастинок	26
1.3. Самоузгоджений опис взаємодіючих фононів кристалічної ґратки.....	28
1.4. Електричні властивості надплинного гелію	31
1.5. Висновки та завдання дисертаційної роботи	37
РОЗДІЛ 2 МОДЕЛЬ ЗВЕДЕНОГО ІЗОТРОПНОГО КРИСТАЛА.....	39
2.1. Зведення опису реального кристала до ізотропного	39
2.2. Дев'ятиконстантна модель опису твердого тіла	42
2.3. Модулі пружності зведеного ізотропного кристала для різних кристалічних систем	45
Висновки до розділу 2	48
РОЗДІЛ 3 ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ З УРАХУВАННЯМ ҐРАТКОВОГО АНГАРМОНІЗМУ	49
3.1. Самоузгоджений опис газу фононів	49
3.1.1. Перенормування фононів.....	51
3.1.2. Наближення ізотропного середовища	55
3.2. Вплив нелінійності на термодинаміку. Розрахунки теплоємності	58
Висновки до розділу 3	65
РОЗДІЛ 4 ДРУГИЙ ЗВУК У КРИСТАЛАХ.....	67
4.1. N- і R-процеси	68
4.2. Знаходження рівнянь газодинаміки для квазічастинок в кристалічних діелектриках.....	70
4.3. Оцінка коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності квазічастинок.....	78
4.4. Розрахунок області існування хвиль другого звуку в алмазі з урахуванням границі і концентрації домішок ізотопів	82

	16
4.4.1. Розрахунок в моделі Калавея.....	87
4.5. Розрахунок області існування хвиль другого звуку в LiF в моделі зведеного ізотропного кристала і моделі Калавея.....	90
Висновки до розділу 4	95
РОЗДІЛ 5 РІВНЯННЯ ДВОРІДИННОЇ ГІДРОДИНАМІКИ З	
УРАХУВАННЯМ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ.....	96
5.1. Гіпотеза існування дипольного моменту ротона.....	96
5.2. Знаходження рівнянь дворідинної гідродинаміки з урахуванням електричного поля.....	98
5.3. Поляризація надплинного гелію при поширенні хвиль другого звуку.....	107
5.4. Зв'язок поляризації з першим звуком	110
Висновки до розділу 5	115
ВИСНОВКИ.....	117
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	119
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ	129

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ І АБРЕВІАТУР

$\chi_{ДЗ}$ – хвилі другого звуку

T – температура

ρ_n – густина нормальної складової гелію He-II

ρ_s – густина надплинної складової гелію He-II

V_l – швидкість повздовжного звуку в твердому тілі

V_t – швидкість поперечного звуку в твердому тілі

$\mathbf{d}$ – вектор дипольного моменту

$\mathbf{P}$ – густина дипольного моменту

C_V – теплоємність при постійному об'ємі

C_p – теплоємність при постійному тиску

$\bar{N}$ – термодинамічно рівноважна функція розподілу квазічастинок

N_0 – локально-рівноважна функція розподілу квазічастинок

v_n – швидкість нормальної складової гелію He-II

v_s – швидкість надплинної складової гелію He-II

$\mathbf{w}$ – відносна швидкість надплинної та нормальної складових гелію

E – пружність електричного поля

ВСТУП

Обґрунтування вибору теми дослідження. Значну кількість сучасних експериментальних і теоретичних робіт з фізики конденсованих середовищ присвячено дослідженню явищ, що ґрунтуються на нелінійних ефектах. До них належать об'ємне теплове розширення, взаємодія акустичних хвиль, поляризація діелектриків, загасання звуку внаслідок взаємодії когерентних фононів з тепловим шумом, відхилення від закону Дюлонга-Пті. Нелінійні пружні властивості і нелінійні хвилі інтенсивно вивчаються з середини 1950х років. Нелінійність в кристалах пов'язана з нелінійністю сил міжмолекулярної взаємодії в твердому тілі. Теоретичний опис передбачає розвинення вільної енергії в ряд за інваріантами тензора деформації до доданків третього і четвертого ступеня, що призводить до громіздких рівнянь руху, оскільки коефіцієнт при доданку четвертого ступеня є тензором восьмого рангу в тривимірному просторі, що містить 126 незалежних елементів для довільної симетрії кристала зі 6561 елемента. Точне розв'язання таких рівнянь є неможливим. Зведення опису пружних властивостей кристала будь якої симетрії до ізотропного середовища істотно спрощує задачу. Так, наприклад, розвинення вільної енергії вже до третіх ступенів за тензором деформації, дало змогу пояснити явище об'ємного теплового розширення та побудувати п'ятиконстантну теорію пружності Ландау.

В області високих температур, де модель Дебая збудження середовища, що являє собою газ невзаємодіючих при будь-якій температурі квазічастинок – фононів, виявляється неповною, оскільки кількість фононів зростає зі збільшенням температури, і взаємодія між ними стає істотною. Температурні залежності термодинамічних коефіцієнтів, які знаходять в експериментах при високих температурах, не збігаються з передбаченнями лінійної теорії, а наявні нелінійні моделі є не до кінця обґрунтованими. Для побудови моделі сильно взаємодіючих фононів потрібно розвинути гамільтоніан в ряд за градієнтами вектора зсуву до доданків четвертого ступеня, що при

спрощеному описі в наближенні ізотропного середовища вимагає розрахунку модулів пружності четвертого порядку середовища, еквівалентного до реального кристалу.

У експериментах під керівництвом О.С. Рибалко [45,46] спостерігалася електрична активність надплинного гелію. Це незвичайне явище полягало в тому, що в стоячій хвилі другого звуку в He-II виникала електрична різниця потенціалів на границі резонатора. При цьому в нормальному стані гелію, а також у хвилі першого звуку, виникнення електричної різниці потенціалів не спостерігалось.

Результати експериментів ініціювали появу цілої низки теоретичних робіт, у яких досліджувалися електромагнітні властивості надплинного гелію. Однак ці теоретичні роботи не давали послідовного і несуперечливого пояснення явищ, які спостерігаються в експерименті. У зв'язку з цим вважається, що дотепер відсутня послідовно обґрунтована теорія електричної активності гелію.

Наявність перерахованих вище невіршених проблем робить актуальним і важливим проведення теоретичних досліджень теплових та електричних властивостей конденсованих середовищ у моделі квазічастинок. Результати таких досліджень становлять основний зміст даної дисертаційної роботи.

Метою дисертаційної роботи є теоретичний опис електричних проявів надплинного гелію та впливу нелінійності кристалічної ґратки твердого тіла на його термодинамічні властивості в моделі взаємодіючих квазічастинок.

Для досягнення поставленої в роботі мети було сформульовано наступні задачі:

- розширити теоретичний опис нелінійних пружних властивостей твердих тіл в моделі ізотропного середовища;
- розробити техніку розрахунку модулів пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів з симетрією довільної кристалічної системи;

- дослідити вплив домішок і границь кристалу на розповсюдження теплових хвиль в твердих тілах;
- побудувати двокомпонентну гідродинаміку квантової рідини з урахуванням зовнішнього електричного поля;
- визначити умови виникнення індукованого електричного поля в газі теплових збуджень надплинного гелію та порівняти їх з наявними експериментальними даними з електромеханічної поляризації гелію.

Об'єкт дослідження: кристали кінцевих розмірів з кубічною кристалічною ґраткою за високих та низьких температур, надплинний гелій у зовнішньому змінному електричному полі.

Предмет дослідження: термодинамічні властивості кристала з урахуванням нелінійних ефектів взаємодії фононів, електричні прояви теплових збуджень надплинного гелію.

Методи дослідження. Для розв'язку поставлених задач використані наступні методи теоретичної фізики: методи теорії збурень – для здобуття вигляду відхилень від локальнорівноважної функції розподілу; метод перетворень Фур'є – для розв'язання системи гідродинаміки лінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних; метод вторинного квантування – для квантового опису полів зсуву, періодичних у просторі та часі, та створення гамільтоніана взаємодіючих фононів твердого тіла; методи електродинаміки суцільних середовищ – для визначення електричних полів, які виникають у надплинному гелію; методи тензорного аналізу – для впорядкування симетрій тензорів вищих рангів у просторі вищих розмірностей.

Наукова новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі вперше здобуто наступні результати:

1. Побудована нелінійна дев'ятиконстантна модель опису твердого тіла, яка враховує взаємодії трьох та чотирьох фононів.

2. Розроблено техніку розрахунку та розраховано модулі пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів.

3. Розраховано відхилення теплоємності твердих тіл за високих температур в залежності від знаку параметра анізотропії для кристалів кубічної кристалічної системи.

4. Розраховано області існування хвиль другого звуку в кристалах алмазу та фториду літія. Визначено внески до часу життя фону кристалічної ґратки від нормальних процесів, процесів перекидання, зіткнень з ізотопами та границею твердого тіла. Розглянуто випадок, коли переважають нормальні процеси.

5. Знайдено систему рівнянь дворідинної гідродинаміки надплинного гелію з урахуванням зовнішнього електричного поля. Доведено, що при русі надплинної складової He-II відносно системи квазічастинок надплинного гелію виникає електричне поле, обумовлене електричними властивостями квазічастинок гелію – ротонами.

6. Обчислено вектор поляризації, обумовлений дипольними моментами ротонів. Знайдений середній дипольний момент ротона узгоджуються з експериментальними даними.

Практичне значення отриманих результатів. Результати роботи мають фундаментальний характер і формують низку нових фундаментальних знань про процеси взаємодії теплових фононів між собою, з домішками та із зовнішніми полями, а також, про електричні властивості надплинного гелію. Визначенні в роботі співвідношення концентрації ізотопів, розміру кристала та температури, за яких є можливим розповсюдження хвиль другого звуку, надають додаткові фізичні методи виміру ізотопічного складу речовини. Теоретичне пояснення відхилення ізохоричної теплоємності кристала за високих температур від закону Дюлонга-Пті робить можливим розробку високочутливих методів нелінійної діагностики, що ґрунтуються на вимірі цієї величини. Методика зведення опису кристала до ізотропного

середовища, як і самі розраховані модулі пружності четвертого рангу, має суттєве теоретичне значення, оскільки вона спрощує спосіб знаходження оцінок нелінійних ефектів у твердих тілах. Використання моделі квазічастинок в дисертаційній роботі дало змогу пояснити особливості явищ, які спостерігалися в експерименті, що підтвердило справедливості цієї моделі для опису широкого класу властивостей квантових суцільних середовищ – від теплових до електричних. Це дає змогу вважати модель квазічастинок надійним інструментом для подальшого розвитку теорії квантових рідин. Гіпотеза існування дипольного моменту ротона, що знайшла підтвердження у дисертаційній роботі, дає змогу дати рекомендації щодо проведення нових експериментів з досліду електричної активності надплинного гелію.

Особистий внесок здобувача. Усі результати, узагальнені в дисертаційній роботі, знайдено в співавторстві за безпосередньої участі здобувача, та опубліковані у статтях [1-6] у фахових журналах і тезах доповідей наукових конференцій за фахом [7-16]. Автор брав активну участь на всіх етапах наукового дослідження: у постановці завдання, аналітичних та числових розрахунках, порівнянні результатів з експериментальними даними, обговоренні результатів і написанні статей.

У роботі [1] автором було отримано дивергентний вид запису закону збереження імпульсу для двокомпонентної рідини у зовнішньому електричному полі. Дана оцінка константи зв'язку електричних і динамічних властивостей надплинного гелію з аналізу даних по поляризації гелію при відносному русі надплинної та нормальної складових. У роботі [3] здобувачем запропоновано механізм зв'язку випромінення/поглинання електромагнітних хвиль з динамікою надплинного гелію. Теоретично обраховано границі появи вузької лінії у спектрі поглинання НВЧ хвиль у He-II за рахунок встановлення анізотропічної орієнтації диполів ротонів. У статтях [2, 4] здобувачем запропоновано модель зіткнень фононів із границею кристала та розраховано температурний проміжок існування теплових хвиль у твердих тілах в залежності від розмірів кристала та його

ізотопічного складу. У роботі [5] дисертантом розроблена техніка розрахунку модулів пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів кубічної кристалічної системи. Здобуто числові значення модулів пружності багатьох речовин. Це дало змогу здобувачу в роботі [6] виявити вплив нелінійності теплових збуджень кристалічної ґратки на термодинамічні властивості твердого тіла. Розрахована ізохорична теплоємність алмазу в проміжку від температури Дебая до плавлення кристалу. У роботі [10] розраховано коефіцієнт згасання низькочастотного змінного електричного поля у надплинному гелії.

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи доповідались на таких національних та міжнародних наукових конференціях за фахом:

- 4-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2010, May 21 – 24, 2010, Kyiv, Ukraine;
- International Symposium on Quantum Fluids and Solids QFS2010, August 1-7, 2010, Grenoble, France;
- 3rd International Conference on Quantum Electrodynamics and Statistical Physics, QEDSP2011, August 29- September 02, 2011, Kharkov, Ukraine;
- 4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, July 3-6, 2012, Lviv, Ukraine;
- Young scientists conference “Problems of Theoretical Physics”, December 24-27, 2013, Kyiv, Ukraine;
- 6-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2014, May 23 – 27, 2014, Kyiv, Ukraine;
- International Conference on Quantum Fluids and Solids QFS2016, August 10-16, 2016, Prague, Czech Republic;
- Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 5-8 грудня 2017, Харків, Україна.
- Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах», 3-5 грудня 2019, Харків, Україна.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертація виконувалась як частина досліджень, що проводилися на фізико-технічному факультеті Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна згідно з координаційним планом Міністерства освіти і науки України за темами «Рідкісні ядерні процеси і розпади, спектроскопія розпадів та структура ядер» (номер держреєстрації 0115U000473, термін виконання 2012р., виконавець), «Квантова теорія систем взаємодіючих фермі- та бозе-частинок» (номер держреєстрації 0117U004866, термін виконання 2017-2019 рр., виконавець), «Енергетична залежність і рефракційні властивості взаємодії легких ядер з ядрами» (номер держреєстрації 0120U102294, термін виконання 2020-2022рр., виконавець). У 2012-2015 рр. робота над дисертацією проводилася в аспірантурі Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна згідно з планом аспіранта.

Публікації. Результати, що представлені у дисертаційній роботі, опубліковано у 6 статтях [1-6] у фахових наукових виданнях, а також у 10 тезах доповідей [7-16] у збірниках праць вітчизняних та міжнародних конференцій за фахом.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел зі 125 найменувань на 10 сторінках та одного додатку. Робота містить 14 рисунків і 6 таблиць, дві з яких займають по сторінці. Загальний обсяг тексту дисертації становить 130 сторінки, обсяг основної частини складає 104 сторінок.

РОЗДІЛ 1

ГАЗОДИНАМІЧНА ТЕОРІЯ БОЗЕ-КВАЗІЧАСТИНОК (ОГЛЯД)

Перший розділ дисертації містить огляд літератури за темою дисертації, його присвячено аналізу історії розвитку та сучасного стану вивчення квазічастинкових систем, та ролі квазічастинок в формуванні термодинамічних, кінетичних та електричних властивостей конденсованих середовищ (підрозділ 1.1). В підрозділ 1.2 аналізуються теоретичні роботи, які присвячені побудові газодинамічної теорії бозе-квазічастинок з довільним законом дисперсії. В підрозділі 1.3 розглянуто самоузгоджений опис взаємодіючих фононів кристалічної решітки. Також проаналізовано стан досліджень електричної активності надплинного гелію (підрозділ 1.4), зв'язок з акустичними хвилями та тепловими збудженнями, зокрема ротонами. В підсумковому підрозділі 1.5 обґрунтовується вибір напрямку досліджень, формулюються висновки та завдання дисертаційної роботи.

1.1. Квазічастинкові системи

Відповідно до загальної концепції Ландау [15], будь-яка конденсована квантова система, що складається з великої кількості частинок і має низько розташовані збуджені стани, наприклад, тверде тіло, може бути описана за допомогою моделі квазічастинок або елементарних збуджень, які підпорядковуються статистиці Фермі-Дірака або Бозе-Ейнштейна. Основний стан системи є вакуумом для цих квазічастинок. Слабозбуджений стан розглядається як слабонеідеальний газ квазічастинок.

Поняття бозе-квазічастинок вводиться при дослідженні коливань різних фізичних величин, що характеризують стан речовини, і квантування цих коливань при переході від хвильового до корпускулярного опису в імпульсному зображенні [16-18]. Наприклад, під час досліду коливань атомів в кристалічній ґратці проводять квантування цих коливань і отримують фонони. Хвильовий вектор коливань, помножений на постійну Планка визначає імпульс квазічастинки або квазіімпульс для кристалічного

середовища, а частота коливань помножена на $\hbar$ визначає енергію квазічастинки. Енергія квазічастинки є деякою функцією квазіімпульса, про яку говорять, що вона визначає закон дисперсії квазічастинки. Стан окремої квазічастинки визначається не тільки квазіімпульсом, але і поляризацією коливань. Ці величини визначають квантовий стан елементарної квазічастинки. Якщо коливання є малими, то енергія збудження тіла буде являти собою суму енергій окремих квазічастинок.

Запровадження для елементарних збуджень терміну «квазічастинка» викликано не тільки зовнішньою схожістю в описі енергії збудженого стану кристала (або рідкого гелію) і ідеального газу, а й глибокої аналогією між квантово-механічними властивостями вільної частинки і елементарним збудженням сукупності взаємодіючих частинок. Залежність частоти від хвильового вектора k дозволяє встановити залежність енергії квазічастинки від квазіімпульса. Цю залежність $\varepsilon = \varepsilon(p)$, що називають законом дисперсії, є основною динамічною характеристикою квазічастинок, зокрема визначає її швидкість $v_{gr} = \partial\varepsilon/\partial p$. Знання закону дисперсії дозволяє досліджувати рух квазічастинки в зовнішніх полях. На відміну від звичайної частинки, квазічастинки не характеризується певною масою. Однак, підкреслюючи схожість квазічастинки і частки, іноді зручно вводити величину, що має розмірність маси. Її називають ефективною масою m_{ef} (як правило, ефективна маса залежить від квазіімпульса і від виду закону дисперсії). Для визначення характеристик квазічастинки використовуються експериментальні методики засновані на аналізі процесів розсіювання нейтронів, розсіяння і поглинання світла, феромагнітного резонансу, гальваномагнітних явищ і т.п. Особливо плідні результати концепція квазічастинок дала в теорії кристалів і рідкого гелію.

1.2. Вторинні хвилі в газі бозе-квазічастинок

В області досить низьких температур можна побудувати загальну теорію квазічастинок, що дозволяє з'ясувати закономірності поведінки газу

квазічастинок. Цією теорією є газодинамічна теорія, яка будується на основі кінетичної теорії для квазічастинок [19, 20]. При цьому можуть бути вивчені різні властивості газу квазічастинок, що описує слабо збуджені стани конденсованих середовищ. Газодинаміка квазічастинок істотно відрізняється від газодинаміки реальних частинок тим, що число квазічастинок в процесах взаємодії можуть не зберігатися. Крім того, в рівняння газодинаміки входять дисипативні складові, що відображають взаємодію квазічастинок із зовнішнім середовищем (процеси перекиду, розсіювання на домішках і т.д.). При виконанні певних умов ці рівняння описують слабозатухаючі вторинні хвилі (ВХ), типу хвиль другого звуку (ХДЗ) в He-II, які є температурними або ентропійними хвилями.

У газодинамічні рівняння для квазічастинок входять кінетичні коефіцієнти, що визначають незворотні процеси, що протікають в газі квазічастинок, а також термодинамічні величини, що характеризують локально квазірівноважний стан газу квазічастинок. Знання цих величин необхідно при вивченні таких явищ як: загасання першого звуку; опис та вивчення слабонерівноважних станів, що виникають при впливі зовнішніх полів (діелектрична релаксація, теплопровідність, питання збудження та існування слабозгасаючих хвиль типу хвиль другого звуку, розсіювання світла) та інших кінетичних явищ, що відбуваються в твердих тілах і квантових рідинах.

Існування своєрідного хвильового процесу в He II вперше було теоретично передбачене Л.Д. Ландау в роботі [15], який назвав його другим звуком. Експериментально він був виявлений В.П. Пешковим [21]. Він же в роботі [22] висловив припущення про можливість існування хвиль другого звуку в твердих тілах. У роботах [23 - 25] вперше теоретично були розглянуті хвилі другого звуку в кристалічних твердих тілах, де вони розглядалися як хвилі стиснення в фононному газі. Більш повний їх розгляд було проведено в роботі [26] виходячи з рівняння Больцмана для фононної функції розподілу. Уточнення цієї теорії, яка полягала в урахуванні як поздовжніх, так і

поперечних акустичних фононів було проведено в [27]. Згодом були побудовані мікроскопічні теорії, в яких враховувалися дисипативні процеси, що призводять до загасання ХДЗ і була встановлена температурна область ("вікно") існування цих хвиль [28-31]. Експериментально ХДЗ в твердих тілах спостерігалися в твердому ^4He [32, 33], в чистих монокристалах NaF [34, 35], в вісмуті [36], в сапфірі [37] при вивченні поширення теплового імпульсу, що збуджується в розглянутих кристалах. ці хвилі, по суті, є хвилями в газі бозе-квазічастинок, їх об'єднує спільність теорії і основні закономірності. Тому в роботі [38] О.І. Ахизером було запропоновано називати їх вторинними хвилями в газі квазічастинок.

Вторинні хвилі в газі квазічастинок існують, коли він знаходиться в так званому гідродинамічному режимі, який встановлюється в ньому за рахунок швидких процесів взаємодії квазічастинок між собою зі збереженням імпульсу і енергії. В роботі [19] були отримані на основі кінетичного рівняння для функції розподілу квазічастинок, система рівнянь газодинаміки бозе-квазічастинок з урахуванням сторонніх полів, що модулюють енергію квазічастинок; розроблений метод розрахунку кінетичних коефіцієнтів, що входять в рівняння газодинаміки квазічастинок. На основі отриманої системи рівнянь газодинаміки квазічастинок знайдені рівняння, що описують вимушені вторинні хвилі в газі квазічастинок, вивчені вторинні хвилі, з'ясовані умови їх існування в конкретних газах квазічастинок.

1.3. Самоузгоджений опис взаємодіючих фононів кристалічної ґратки

Квантова механіка до опису теплоємності твердих тіл вперше була застосована Ейнштейном [39]. У його моделі тверде тіло розглядається як набір квантових гармонійних осциляторів. Ейнштейну вдалося пояснити відхилення в поведінці теплоємності при низьких температурах від закону Дюлонга-Пті, однак отримана швидкість убуття теплоємності мала експонентний характер і суттєво відрізнялася від степеневого закону убуття, що спостерігається в експерименті. Інший підхід до квантового

опису твердого тіла був запропонований Дебаєм [40]. У його моделі тверде тіло розглядається як суцільне середовище, збудження якого є квантованими. Фактично Дебаєм вперше було проквантовано нерелятивістське поле. Дебаю в його моделі вдалося отримати правильну поведінку низькотемпературної теплоємності, пропорційної кубу температури, і їм було введено в фізику фундаментальне для теорії твердого тіла поняття температури (енергії або частоти) Дебая. Фактично, як зараз ясно, моделі Ейнштейна і Дебая описують тверде тіло з різних сторін і доповнюють одна одну. Модель Ейнштейна описує одночасткові збудження і зберігає своє значення при описі, наприклад, оптичних гілок коливань, а модель Дебая дає квантовий опис колективних збуджень твердого тіла. Теорія Дебая в своїй простоті і наочності виявилася настільки вдалою, що застосовувалася і продовжує застосовуватися набагато частіше, ніж опублікована приблизно в той же час більш детальна теорія кристалічної ґратки Борна-Кармана [41].

У моделі Дебая збудженням середовища є газ невзаємодіючих при будь-якій температурі квазічастинок – фононів. Однак неважко переконатися, що число фононів зростає зі збільшенням температури і, отже, взаємодія між ними стає все більш істотною. В роботі [42] модель Дебая узагальнюється на випадок газу фононів, взаємодія між якими враховується в наближенні самоузгодженого поля. Урахування фонон-фононної взаємодії призводить до того, що швидкість таких «самоузгоджених» фононів стає функцією температури і не передбачається заданою, а знаходиться в результаті розв'язання нелінійного алгебраїчного рівняння, яке виводиться з умови мінімуму вільної енергії. «Самоузгоджена» енергія Дебая в такому підході також є функцією температури. Знайдено термодинамічні функції газу таких фононів і, зокрема, обчислена фононна теплоємність. В [42] показано, що при низьких температурах до кубічного закону в температурній залежності теплоємності з'являється добавка, пропорційна сьомій ступені температури. Це, мабуть, може бути причиною, по якій кубічний закон для теплоємності спостерігається в експерименті тільки при досить низьких температурах. При

високих температурах теорія передбачає лінійне по температурі відхилення теплоємності від закону Дюлонга-Пті, що спостерігається експериментально.

Для простоти припустимо використовувати скалярну модель кристала [43], в якій зміщення атомів характеризується скалярною величиною $\varphi(\mathbf{r})$. Очевидно, що в такій моделі не враховуються ефекти, зумовлені поляризацією коливань. У скалярній моделі взаємодія фононів в головному наближенні описується гамільтоніаном H_I , що містить четверту ступінь градієнта поля деформації. У більш реалістичній моделі деформація кристала повинна описуватися вектором деформації, внаслідок чого гамільтоніан взаємодії буде містити також кубічні члени за градієнтам вектора деформації навіть в разі ізотропного середовища. Однак, як можна показати, урахування кубічних доданків не вплине на основні співвідношення, одержувані в моделі самоузгодженого поля, і призводить тільки до деякого перевизначення коефіцієнтів в рівняннях. Для урахування можливості різних поляризацій, залишаючись в рамках скалярної моделі, самоузгоджений гамільтоніан множать на число поляризацій, рівне для простої ґратки трьом.

В [44] повний гамільтоніан розбивають на суму двох доданків $H = H_S + H_C$, де H_S – перенормований гамільтоніан, що описує «вільні» фонони, а H_C – кореляційний гамільтоніан описує взаємодію таких фононів. Самоузгоджений гамільтоніан H_S відрізняється від гамільтоніана H_0 в моделі Дебая, перенормований внаслідок взаємодії пружної постійної $\tilde{g}$ і наявністю неоператорного доданка ε_0 , урахування якого є істотним. Таким чином, приблизно взаємодія між початковими фононами враховується в гамільтоніані H_S , а гамільтоніан H_C враховує залишкову взаємодію, не включену в модель самоузгодженого поля.

Уявлення про квазічастинки за своєю суттю є наближенням, оскільки якби була можливість точно вирішити багаточасткові задачі, то необхідність у введенні поняття про квазічастинки не з'являлася. Однак, оскільки багаточасткові задачі точно розв'язані бути не можуть, уявлення про

квазічастинки, носить фундаментальний характер, хоча саме введення квазічастинок для тієї чи іншої системи неоднозначно. Найбільш реальними слід вважати ті квазічастинки, які максимально добре описують дану систему в моделі ідеального газу цих квазічастинок.

1.4. Електричні властивості надплинного гелію

У роботах [45,46] спостерігався якісно новий, невідомий раніше ефект – виникнення електричної індукції в надплинному ^4He (He-II) при збудженні в ньому періодичного (нерівномірного) відносного руху нормальної і надплинної складових.

В роботі [45] (при дослідженні поширення першого і другого звуків в He-II) спостерігалось виникнення в стоячій хвилі другого звуку електричної індукції, спрямованої паралельно вектору швидкості надплинної складової, $\vec{v}_s$. При цьому було встановлено, що амплітуда коливань температури ΔT в ХДЗ і змінного електричного потенціалу ΔU , що має ту ж частоту, що і коливання температури, пов'язані з точністю $\pm 25\%$ співвідношенням:

$$\frac{\Delta T}{\Delta U} \cong \frac{2e}{k_B} \approx 2.32 \cdot 10^4 \text{ K} \cdot \text{B}^{-1} \quad (1.1)$$

де e – заряд електрона, а k_B – стала Больцмана. В області температур, для якої проводилися вимірювання в [45] ($1.4 \leq T \leq 2\text{K}$), співвідношення (1.1) не залежить від температури в межах зазначеної точності.

У роботі [46] була зареєстрована змінна електрична поляризація рідкого He-II, індукована крутильними коливаннями торсіонного осцилятора [47]. Останній був циліндричною ємністю, закріпленою на торсіонному підвісі (капілярі), з плівкою He-II на внутрішній поверхні, або з масивною кількістю He-II всередині неї. Рух стінок порожнини зі швидкістю $\vec{v}(t) = \varphi_0 R \omega_{\text{tor}} \cos(\omega_{\text{tor}} t)$, де ω_{tor} – частота крутильних коливань, φ_0 – їх кутова амплітуда, R – внутрішній радіус циліндричної порожнини, захоплювало нормальну складову He-II. Напрямок вимірюваного змінного електричного поля $\vec{E}(t)$ був перпендикулярним до $\vec{v}(t)$ (тобто вздовж радіуса порожнини).

При цьому індукований потенціал $U(t)$ був (в основній його частині) пропорційний квадрату швидкості $\vec{v}(t)$. Для випадку масивного кількості He-II в порожнині квадратичне зростання вимірюваного потенціалу ΔU з ростом амплітуди швидкості мало місце лише при малих амплітудах крутильних коливань φ_0 . При їх збільшенні вище певної межі величина ΔU різко падала, що автори пов'язують з перевищенням швидкості руху рідини, що захопилася, порога вихреутворення.

Причини виникнення електричної індукції в електрично нейтральному He-II і підстави для виконання співвідношення (1.1) при поширенні другого звуку не знайшли дотепер задовільного пояснення, хоча вживався ряд спроб зрозуміти це явище [48-50].

У [48] передбачалася можливість виникнення в надплинному гелії макроскопічно упорядкованого електричного квадрупольного моменту, поляризація якого неоднорідною течією надплинного потоку служить причиною появи електричної індукції. Але мікроскопічна причина появи такого квадрупольного моменту залишається при цьому невідомою.

У [49] для пояснення виявленої в [45] електричної поляризації He-II був запропонований ефект, аналогічний відомому в металах ефекту Стюарта-Толмена [51] і обумовлений інерційної поляризованістю атомів ^4He за рахунок великої різниці мас електронів і ядер. В [49] отримані загальні вирази для вектора гравітаційної (або інерційної) поляризованості, з яких для відношення амплітуди коливань температури ΔT в хвилі другого звуку до амплітуди викликаного ним електричного потенціалу ΔU можна отримати аналог співвідношення (1.1):

$$\frac{\Delta T}{\Delta U} = \frac{12e}{m_4 C(T)} = \frac{2e}{k_B} \frac{6}{f(T)} \quad (1.2)$$

Тут m_4 - маса атома ^4He , $C(T)$ – питома теплоємність в розрахунку на одиницю маси (в наближенні $C_p(T) \cong C_v(T) \cong C(T)$). Розмірність $C(T)$ збігається з розмірністю відносини k_B/m_4 , так що $C(T) = f(T) \cdot k_B/m_4$, де $f(T)$ - безрозмірна функція, яка описувала температурну залежність $C(T)$.

Підстановка в (1.2) відомих з літератури [52,53] даних по теплоємності He-II в області температур, для якої проводилися вимірювання [45], показує, що відношення $6/f(T)$, по-перше, істотно більше одиниці (тобто розрахована величина ΔU набагато менше експериментальної), а по-друге, сильно залежить від температури, що суперечить експериментальним даним роботи [45].

В [50] відзначено кількісна неузгодженість висновків [49] і результатів [45] і обговорена можливість появи електричної індукції за рахунок того ж інерційного ефекту, що і в [49], але тільки під дією відцентрової сили, що виникає в полі азимутальних швидкостей руху надплинної складової навколо осей квантових вихорів в He-II. Електричне поле при цьому має бути нормальним до осі вихору. Згідно з проведеними в [50] оцінками для окремого вихору, воно може бути значним (близько 300 В/см). Однак для появи різниці електричних потенціалів на електродах в схемах експериментів [45,46] потрібні спеціальні умови, що накладаються на концентрацію і конфігурацію вихорів, які в [50] не обговорене. Більш того, в роботі [46] було встановлено, що в експериментах з торсійним осцилятором електрична поляризація в масивному He-II різко падала при швидкостях руху нормальної складової вище порога народження вихорів.

Таким чином, в розглянутих теоретичних моделях виникає ряд труднощів при поясненні експериментальних даних робіт [45,46] і, зокрема, співвідношення (1.1). У [54] запропоновано одне з можливих пояснень виникнення електричного поля в процесі поширення другого звуку.

У роботах [55-57] були опубліковані результати експериментів, в яких за допомогою зануреного в He-II діелектричного резонатора у вигляді круглого диска радіусом $R_0 \approx 1$ см і товщиною $l \approx 1$ мм вивчалось поглинання ЕМ хвиль НВЧ діапазону $(80 \div 240)$ ГГц. У цих експериментах вперше була виявлена надзвичайно вузька лінія поглинання на частотах, які відповідають умові $f_0(T) = \Delta_r(T)/2\pi\hbar$, де $\Delta_r(T)$ - залежить від температури ротонної

щілини в спектрі елементарних збуджень He-II. Аномально вузька резонансна лінія, ширина якої на шість-сім порядків менше ротонної частоти $f_0(T)$, спостерігалася на тлі набагато більш широкої смуги поглинання («п'єдесталу») шириною близько $(30 \div 40)$ ГГц. Частота резонансної лінії монотонно зменшувалася з підвищенням температури від максимального значення $f_0^{\max} \approx 180$ ГГц при $T = 1.4$ К, коли $\Delta_r/k_B \approx 8.65$ К (де k_B - постійна Больцмана), до мінімального значення $f_0^{\min} \approx 110$ ГГц при, $T = T_\lambda$ коли $\Delta_r/k_B \approx 5.52$ К, в повній відповідності з температурною залежністю ротонної щілини $\Delta_r(T)$, відомої з результатів нейтронних експериментів [58, 59].

При цьому ширина резонансної лінії поглинання, що дорівнює $\Delta f \approx 20$ кГц при $T = 1.4$ К, зростала з підвищенням температури і при $T \approx T_\lambda$ досягала значення $\Delta f \approx 200$ кГц, а в області $T > T_\lambda$ зберігалася слабка розмита лінія поглинання шириною $\Delta f \approx 400$ кГц на мінімальній частоті 110 ГГц, що свідчить про існування кінцевої ротонної щілини в нормальному рідкому гелії (He-I) вище λ -точки.

Як було показано в наступних експериментах [60], в постійному електричному полі, направленому перпендикулярно бічній поверхні резонатора, відбувається симетричне дублетне розщеплення вузької резонансної лінії НВЧ поглинання, причому ширина розщеплення пропорційна напруженості поля, за аналогією з лінійним ефектом Штарка.

Крім того, в роботі [61] вперше спостерігався ефект негативного поглинання (індукованого випромінювання) енергії ЕМ хвиль на ротонній частоті за наявності в He-II стаціонарного теплового потоку, створюваного за допомогою струменя нормальної складової, яка витікає з сопла «теплової гармати» Капіци [62]. Інтенсивність позитивного і негативного НВЧ поглинання змінювалася дискретно при безперервній зміні потужності «теплової гармати», що за припущенням авторів [61] пов'язано з квантуванням азимутальної швидкості макроскопічного вихрового потоку надплинної складової, що обертається навколо диска резонатора назустріч

струмені нормальної складової. Однак природа такого зв'язку не була встановлена.

Механізм як позитивного, так і негативного НВЧ поглинання на ротонній частоті, незважаючи на ряд спроб його пояснення, до теперішнього часу не з'ясований. Так, наприклад, в роботі [55] висловлювалося припущення про те, що поглинання фотонів на резонансній частоті супроводжується народженням ротонів, і обговорювалося питання про закон збереження імпульсу з урахуванням передачі великого імпульсу ротонів твердій стінці резонатора з можливим народженням в ньому фононів, однак процес такої непружної взаємодії ротонів з поверхнею твердого тіла розглянутий не був.

При цьому залишається також незрозумілим сам механізм взаємодії ротонів в нейтральній бозе-рідині He-II з ЕМ полем. В роботі [57] було висловлено припущення про те, що електрична компонента ЕМ поля резонатора взаємодіє з дипольним моментом ротонів, який виникає в результаті асиметричного розподілу щільності в ротонному збудженні, однак жодних обґрунтувань такого механізму формування дипольного моменту ротонів в об'ємі He-II не було наведено. З іншого боку, для пояснення аномально малої ширини лінії резонансного поглинання в [57] було висунуто припущення про передачу імпульсу ротонів макроскопічно когерентній надплинній складовій як цілому, за аналогією з ефектом Мессбауера в твердому тілі, хоча механізм такої передачі імпульсу в квантовій бозе-рідині He II, запропонований в [57], не можна вважати обґрунтованими.

Негативне поглинання (випромінювання) фотонів ЕМ поля трактувалося в роботі [61] в рамках простої «дворівневої» моделі квантової рідини ^4He з верхнім «рівнем» на краю ротонної щілини, інверсна заселеність якого виникає під дією «теплової гармати» Капіци, однак обґрунтування такої моделі «квантового генератора» для He-II в [61] відсутнє.

Нещодавно був опублікований ряд теоретичних робіт [63-66], в яких робилися спроби пояснення механізму взаємодії ротонів з ЕМ полем.

Зокрема, в роботі [63] розглядалася можливість виникнення дипольного моменту у ротонів в рамках моделі мікроскопічного квантового вихрового кільця, що рухається в надплинній рідині. Однак, на основі симетрійних міркувань в [63] було показано, що постійний дипольний момент у ротонів в об'ємі He-II повинен бути відсутнім. Крім того, сама модель ротонів у вигляді вихрового кільця не узгоджується з тим фактом, що кінцева ротонна щільність зберігається в спектрі нормального рідкого гелію (He-I) вище λ -точки, коли існування квантових вихорів і вихрових кілець неможливо через відсутність когерентної надплинної складової.

У роботах [64-66] було введено уявлення про «циркулярні» фонони та ротони, хвильові функції яких мають таку ж просторову структуру і симетрію, як і поверхневі власні ЕМ моди циліндричного резонатора, і не володіють певним імпульсом. Однак, такий макроскопічний стан, властивий лінійним полям (зокрема, ЕМ полю), не може реалізуватися для ротонних збуджень, які є квантами нелінійного бозонного поля (бозе-рідини) з сильною взаємодією між бозонами і являють собою локалізовані хвильові пакети [67].

В роботі [68] висловлюється припущення, що ефекти в експериментах [55-57] можуть бути наслідком розглянутого в [69] флексоелектричного ефекту в неоднорідному He-II, тобто механізму поляризації атомів гелію (^4He) під дією локальних градієнтів щільності в He-II, коли в області неоднорідності виникає асиметрія сил Ван-дер-Ваальса, діючих на атом ^4He з боку сусідніх атомів. А також висловлюється припущення про те, що причиною аномально малої ширини цієї лінії ($\Delta f \approx 20$ кГц при $T = 1.4$ К і $\Delta f \approx 200$ кГц при $T = T_\lambda$) є існування стаціонарного дипольного шару поблизу поверхні резонатора, пов'язаного з поляризацією атомів ^4He під дією приповерхневого градієнта щільності в He-II, який виникає завдяки зверненню в нуль щільності надплинної складової на будь-якій твердій стінки [70].

1.5. Висновки та завдання дисертаційної роботи

Аналіз робіт, присвячених дослідженням температурної залежності термодинамічних величин кристалічних твердих тіл в області високих температур (порівняно з температурою Дебая), а також робіт, присвячених електричній активності рідкого гелію, показав, що в даний час:

- існує ціла низка експериментальних даних, які не отримали вичерпного фізичного пояснення;
- теоретичні моделі не повністю описують експериментальні дані і часто не узгоджуються між собою;
- розглянуті явища вимагають подальшого експериментального і теоретичного досліджень.

Основною метою дисертаційної роботи є теоретичні дослідження поведінки квазічастинкових систем в твердих тілах в області високих та низьких температур, а також у надплинному гелію за наявності зовнішнього електричного поля.

Для досягнення поставленої в роботі мети необхідно було вирішити такі задачі:

- розширити теоретичний опис нелінійних пружних властивостей твердих тіл в моделі ізотропного середовища;
- розробити техніку розрахунку модулів пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів з симетрією довільної кристалічної системи;
- дослідити вплив домішок і границь кристалу на розповсюдження теплових хвиль в твердих тілах;
- побудувати двокомпонентну гідродинаміку квантової рідини з урахуванням зовнішнього електричного поля;
- визначити умови виникнення індукованого електричного поля в газі теплових збуджень надплинного гелію та порівняти їх з наявними експериментальними даними з електромеханічної поляризації гелію.

Дисертація виконувалась як частина досліджень, що проводилися на кафедрі фізики ядра та високих енергій імені О.І. Ахієзера фізико-технічного факультету Харківського національного університету імені В.Н.Каразіна МОН України. Теоретичні дослідження та здобуті фізичні результати описані в наступних чотирьох розділах дисертації.

РОЗДІЛ 2. МОДЕЛЬ ЗВЕДЕНОГО ІЗОТРОПНОГО КРИСТАЛА

Існує ряд фізичних явищ в кристалах, які не можна описати в гармонійному наближенні без урахування взаємодії фононів між собою. Зокрема, до них можна віднести теплове розширення твердого тіла, різниця ізохоричної і ізобаричної теплоємності, явища теплопровідності, поляризації діелектрика, різниця між ізотермічним і адіабатичним процесами [71]. Оскільки для перерахованих явищ в твердому тілі основну роль грають низькочастотні фононні коливання, то для опису цих явищ можна використовувати макроскопічну теорію пружності, замінюючи кристал суцільним середовищем, що має симетрію кристалічної ґратки.

У цьому розділі побудована модель зведеного ізотропного кристала з точністю до доданків четвертого порядку за інваріантами тензора деформації у розвиненні вільної енергії. Проведено процедуру зведення опису пружних властивостей твердого тіла до ізотропного середовища. Виявлено додаткові зв'язки між згортками тензора модулів пружності восьмого рангу в тривимірному просторі. Здобуто формули для модулів пружності четвертого порядку зведеного ізотропного кристала для довільної кристалічної системи. Як приклад використання, розраховано модулі пружності четвертого порядку зведеного ізотропного кристала через згортки тензора модулів пружності деяких кристалів кубічної кристалічної системи, які використовуються для розрахунків теплоємності у наступному розділі. Матеріали даного розділу опубліковані в [6].

2.1. Зведення опису реального кристала до ізотропного

Спроба зведення реального кристала до ізотропному середовища була зроблена в моделі Дебая, де швидкість звуку вибирається як усереднена швидкість поздовжніх і поперечних хвиль,

$$\frac{3}{V_s^3} = \frac{2}{V_t^3} + \frac{1}{V_l^3} \quad (2.1)$$

Ідея розгляду кристала як ізотропного середовища розвинена в теорії пружності Ландау [72]. Розкладання густини вільної енергії за ступенями тензора деформації проводилося до третього ступеня. У ній використовувалися модулі пружності другого порядку λ і μ і модулі третього порядку A , B і C , оскільки з компонент симетричного тензора другого рангу можна скласти два квадратичних скаляра та три кубічних. Таким чином поздовжні і поперечні властивості речовини стосовно напрямку поширення хвилі поділялися навіть для моделі ізотропного середовища. Анггармонізм враховували складові з постійними A , B , C .

У роботі [73] була запропонована модель ізотропного кристалу, який за своїми пружним властивостям найбільш близький до реального. У [74] її назвали моделлю зведеного ізотропного кристала (reduced isotropic crystal model, скорочено RICM). Повна характеристика всіх пружних властивостей кристала укладена в тензор модулів пружності. Тому можна знайти тензор модулів пружності ізотропного середовища, який найменш відрізнявся б від тензора модулів пружності для заданого кристала. Умовою цього є мінімальність виразу $|\lambda_{iklmnpqt}^{(\text{Re})} - \lambda_{iklmnpqt}^{(0)}|^2$, де $\lambda_{iklmnpqt}^{(\text{Re})}$ — тензор модулів пружності даного кристала, $\lambda_{iklmnpqt}^{(0)}$ — тензор модулів пружності зведеного ізотропного кристала. Кількість індексів тензора вказує на порядок розкладання густини вільної енергії.

$$F = F_0 + F_2 + F_3 + F_4, \quad (2.2)$$

тут F_0 — вільна енергія недеформованого кристала. Доданок пропорційний першому ступеню за тензором деформації відсутній, інші представлені такими виразами:

$$F_2 = \frac{1}{2!} \lambda_{iklm} u_{ik} u_{lm}, \quad F_3 = \frac{1}{3!} \lambda_{iklmnp} u_{ik} u_{lm} u_{np}, \quad F_4 = \frac{1}{4!} \lambda_{iklmnpqt} u_{ik} u_{lm} u_{np} u_{qt},$$

де $u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right)$ — тензор деформації, u_i — вектор деформації (зсуву), λ_{iklm} , λ_{iklmnp} , $\lambda_{iklmnpqt}$ — тензори модулів пружності четвертого, шостого та восьмого рангу відповідно.

Властивості ізотропного середовища за визначенням інваріантні по відношенню до всіх перетворень ортогональної групи. Це дозволяє відразу встановити загальний вигляд тензора λ . Оскільки тензор λ містить певні властивості ізотропного середовища — він повинен бути інваріантний по відношенню до всіх перетворень ортогональної групи. Однак існує єдиний тензор, що не змінюється при будь-яких ортогональних перетвореннях — це одиничний тензор (з точністю до скалярного множника). Тому компоненти тензора λ повинні виражатися через комбінації компонент одиничного тензора δ_{ik} з деякими коефіцієнтами. Для λ_{aibj} можна побудувати три різні комбінації компонент одиничного тензора, що містять чотири індекси i, j, a, b : $\delta_{ai}\delta_{bj}$, $\delta_{aj}\delta_{bi}$. Тому тензор λ_{aibj} повинен виражатися наступним чином:

$$\lambda_{aibj} = \lambda \delta_{ai} \delta_{bj} + \mu (ij, ba), \quad (2.3)$$

оскільки його вигляд не повинен змінюватися при перестановці індексів i, a , та пар індексів aj, bj . Введено позначення $(ij, ab) \equiv \delta_{ij}\delta_{ab} + \delta_{ia}\delta_{jb}$. Тензор має дві незалежні величини λ, μ — коефіцієнти Ламе, тобто всі елементи тензора λ_{aibj} виражаються через них.

Вимагаючи аналогічних симетрій за індексами, можна побудувати тензори модулів пружності шостого і восьмого рангу

$$\begin{aligned} \lambda_{aibjck} = & A \delta_{ai} \delta_{bj} \delta_{ck} + B \left[\delta_{ai} (jk, cb) + \delta_{bj} (ik, ca) + \delta_{ck} (ij, ba) \right] + \\ & + C \left[\delta_{ac} (ij, bk) + \delta_{ak} (ij, bc) + \delta_{ic} (jk, ab) + \delta_{ik} (ab, jc) \right], \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\lambda_{aibjckdl} = C_1 \delta_{ai} \delta_{bj} \delta_{ck} \delta_{dl} + C_2 \lambda_{aibjckdl}^{(2)} + C_3 \lambda_{aibjckdl}^{(3)} + C_4 \lambda_{aibjckdl}^{(4)} + C_5 \lambda_{aibjckdl}^{(5)}, \quad (2.5)$$

де

$$\lambda_{aibjckdl}^{(2)} \equiv \delta_{ai}\delta_{bj}(lk, cd) + \delta_{ai}\delta_{ck}(jl, db) + \delta_{ai}\delta_{dl}(jk, cb) + \\ + \delta_{bj}\delta_{ck}(il, da) + \delta_{bj}\delta_{dl}(ik, ca) + \delta_{ck}\delta_{dl}(ij, ba),$$

$$\lambda_{aibjckdl}^{(3)} \equiv \delta_{ai} \left[\delta_{bd}(jk, cl) + \delta_{bl}(jk, cd) + \delta_{jd}(kl, bc) + \delta_{jl}(bc, kd) \right] + \\ + \delta_{bj} \left[\delta_{ac}(kl, di) + \delta_{ci}(kl, da) + \delta_{ka}(li, cd) + \delta_{ik}(ad, lc) \right] + \\ + \delta_{ck} \left[\delta_{bd}(il, ja) + \delta_{dj}(il, ba) + \delta_{lb}(ij, da) + \delta_{jl}(ab, di) \right] + \\ + \delta_{dl} \left[\delta_{ac}(ij, bk) + \delta_{ak}(ij, bc) + \delta_{ic}(jk, ab) + \delta_{ik}(ab, jc) \right],$$

$$\lambda_{aibjckdl}^{(4)} \equiv (il, da)(jk, cb) + (ik, ca)(jl, db) + (ij, ba)(kl, dc)$$

$$\lambda_{aibjckdl}^{(5)} \equiv (ab, ci)(jl, dk) + (ij, ca)(kl, db) + (ik, ba)(jl, dc) + \\ + (ij, ka)(bl, dc) + (ab, jc)(il, dk) + (ij, bc)(kl, da) + \\ + (ab, jk)(il, dc) + (ij, bk)(cl, da) + (ad, ci)(jk, lb) + \\ + (jl, cb)(ik, da) + (jk, db)(il, ca) + (il, ka)(cj, bd).$$

Тензор шостого порядку (2.4) визначається трьома модулями пружності A, B, C , а тензор восьмого порядку (2.5) – п'ятьма модулями пружності $C_1 \div C_5$. Таким чином пружні властивості середовища можна звести в дев'ять констант для даної речовини.

2.2. Дев'ятиконстантна модель опису твердого тіла

Як саме модулі пружності λ, μ, A, B, C пов'язані з елементами тензора модулів пружності реального кристала наведено в [75]. Знайдемо відповідні вирази для тензор восьмого рангу. Для цього підставимо вираз (2.5) в $\left| \lambda_{iklmnpqt}^{(\text{Re})} - \lambda_{iklmnpqt} \right|^2$, проведемо згортку за всіма індексами, візьмемо похідні по C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 та прирівняємо нулю. Розв'язок відносно C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 такої системи буде тривіальним, оскільки згортки за різними парам індексів тензора модулів пружності восьмого рангу є залежними. З'ясуємо зв'язок між згортками.

Симетрії тензора модулів пружності восьмого рангу в тривимірному просторі кристала будь-якої сингонії еквівалентні симетріям за індексами добутку чотирьох симетричних тензорів другого рангу. Уведемо інваріанти J для позначення різних згорток такого добутку.

$$J_1 \equiv u_{ii} = u_{11} + u_{22} + u_{33},$$

$$J_2 \equiv u_{ai}u_{ai} = u_{11}^2 + u_{22}^2 + u_{33}^2 + 2u_{12}^2 + 2u_{13}^2 + 2u_{23}^2,$$

$$J_3 \equiv u_{ai}u_{ib}u_{ba} = u_{11}^3 + u_{22}^3 + u_{33}^3 + 3u_{11}u_{12}^2 + 3u_{11}u_{13}^2 + 3u_{22}u_{12}^2 + 3u_{22}u_{23}^2 + 3u_{33}u_{13}^2 + 3u_{33}u_{23}^2 + 6u_{12}u_{13}u_{23},$$

$$J_4 \equiv u_{ai}u_{ib}u_{bj}u_{ja} = u_{11}^4 + u_{22}^4 + u_{33}^4 + 2u_{12}^4 + 2u_{13}^4 + 2u_{23}^4 + 4u_{12}^2u_{13}^2 + 4u_{12}^2u_{23}^2 + 4u_{13}^2u_{23}^2 + 4u_{11}^2u_{12}^2 + 4u_{11}^2u_{13}^2 + 4u_{22}^2u_{12}^2 + 4u_{22}^2u_{23}^2 + 4u_{33}^2u_{13}^2 + 4u_{33}^2u_{23}^2 + 4u_{11}u_{22}u_{12}^2 + 4u_{11}u_{33}u_{13}^2 + 4u_{22}u_{33}u_{23}^2 + 8u_{11}u_{12}u_{13}u_{23} + 8u_{22}u_{12}u_{13}u_{23} + 8u_{33}u_{12}u_{13}u_{23}.$$

При таких позначеннях вираз для розвинення вільної енергії (2.2) значно спроститься. Враховуючи $J_1^2 = u_{ii}u_{jj}$, $2J_2 = (ij, ba)u_{ai}u_{bj}$, отримаємо

$$F_2 = \frac{1}{2!}(\lambda J_1^2 + 2\mu J_2), \quad F_3 = \frac{1}{3!}(AJ_1^3 + 5BJ_1J_2 + 8CJ_3).$$

Для отримання F_4 необхідно врахувати наступні згортки (2.5) з чотирма тензорами деформації

$$\begin{aligned} \lambda_{aibjckdl}^{(2)} u_{ai}u_{bj}u_{ck}u_{dl} &= 12J_1^2J_2, & \lambda_{aibjckdl}^{(3)} u_{ai}u_{bj}u_{ck}u_{dl} &= 32J_1J_3, \\ \lambda_{aibjckdl}^{(4)} u_{ai}u_{bj}u_{ck}u_{dl} &= 12J_2^2, & \lambda_{aibjckdl}^{(5)} u_{ai}u_{bj}u_{ck}u_{dl} &= 48J_4. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Тоді

$$F_4 = \frac{1}{4!}(C_1J_1^4 + 12C_2J_1^2J_2 + 32C_3J_1J_3 + 12C_4J_2^2 + 48C_5J_4). \quad (2.7)$$

Зберемо з J_1, J_2, J_3 величини четвертого рангу за u_{ik} , складемо з них лінійну комбінацію, і прирівняємо до J_4

$$\alpha J_1^4 + \beta J_1^2J_2 + \gamma J_1J_3 + \delta J_2^2 = J_4.$$

Прирівнюючи коефіцієнти при відповідних ступенях u_{ik} , одержимо неоднорідну систему для $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Розв'язуючи систему, знайдемо зв'язок для інваріантів (згорток):

$$J_4 = \frac{1}{6} J_1^4 - J_1^2 J_2 + \frac{4}{3} J_1 J_3 + \frac{1}{2} J_2^2 \quad (2.8)$$

З урахуванням останнього, вираз (2.7) набуде вигляду

$$F_4 = \frac{1}{4!} (DJ_1^4 + 12EJ_1^2 J_2 + 32FJ_1 J_3 + 12GJ_2^2),$$

де введені перепозначення

$$D = C_1 + 8C_5, E = C_2 - 4C_5, F = C_3 + 2C_5, G = C_4 + 2C_5.$$

З урахуванням цих співвідношень тензор модулів пружності четвертого порядку (2.5) може бути представлений у вигляді:

$$\lambda_{aibjckdl} = D\delta_{ai}\delta_{bj}\delta_{ck}\delta_{dl} + E\lambda_{aibjckdl}^{(2)} + F\lambda_{aibjckdl}^{(3)} + G\lambda_{aibjckdl}^{(4)} + C_5\tilde{\lambda}_{aibjckdl}^{(5)} \quad (2.9)$$

де

$$\tilde{\lambda}_{aibjckdl}^{(5)} = \lambda_{aibjckdl}^{(5)} - 8\delta_{ai}\delta_{bj}\delta_{ck}\delta_{dl} + 4\lambda_{aibjckdl}^{(2)} - 2\lambda_{aibjckdl}^{(3)} - 2\lambda_{aibjckdl}^{(4)}.$$

В силу співвідношень (2.6) і (2.8) $\tilde{\lambda}_{aibjckdl}^{(5)} u_{ai} u_{bj} u_{ck} u_{dl} = 0$, а тому останній доданок в (2.9) не дає внеску у вільну енергію, і його треба опустити.

Таким чином вільна енергія з розкладанням до членів четвертого порядку набуде вигляду

$$\begin{aligned} F = & F_0 + \frac{1}{2!} (\lambda J_1^2 + 2\mu J_2) + \\ & + \frac{1}{3!} (AJ_1^3 + 5BJ_1 J_2 + 8CJ_3) + \\ & + \frac{1}{4!} (DJ_1^4 + 12EJ_1^2 J_2 + 32FJ_1 J_3 + 12GJ_2^2). \end{aligned}$$

2.3. Модулі пружності зведеного ізотропного кристала для різних кристалічних систем

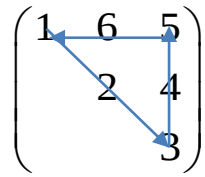
Отже, існує дев'ять незалежних констант, з яких можна зібрати тензори модулів пружності зведеного ізотропного кристала. Для знаходження їх зв'язку з модулями реального кристала вчинимо як на початку попереднього пункту, але вже для констант D, E, F, G .

$$\begin{aligned}
 D &= \frac{1}{56700} \left(1123\lambda_{iikllpp}^{(Re)} - 618\lambda_{iiklpl}^{(Re)} - 2296\lambda_{iikllppk}^{(Re)} - 1671\lambda_{iikilpl}^{(Re)} + 3522\lambda_{iikllppi}^{(Re)} \right) \\
 E &= \frac{1}{113400} \left(-103\lambda_{iikllpp}^{(Re)} + 438\lambda_{iiklpl}^{(Re)} + 376\lambda_{iikllppk}^{(Re)} + 411\lambda_{iikilpl}^{(Re)} - 1002\lambda_{iikllppi}^{(Re)} \right) \\
 F &= \frac{1}{226800} \left(-287\lambda_{iikllpp}^{(Re)} + 282\lambda_{iiklpl}^{(Re)} + 1184\lambda_{iikllppk}^{(Re)} + 39\lambda_{iikilpl}^{(Re)} - 978\lambda_{iikllppi}^{(Re)} \right) \\
 G &= \frac{1}{226800} \left(-557\lambda_{iikllpp}^{(Re)} + 822\lambda_{iiklpl}^{(Re)} + 104\lambda_{iikllppk}^{(Re)} + 2469\lambda_{iikilpl}^{(Re)} - 2598\lambda_{iikllppi}^{(Re)} \right)
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Величини в дужках — це згортки тензора модулів пружності реального кристала. У тензора восьмого рангу $\lambda_{iklmnpqt}^{(Re)}$ в тривимірному просторі 6561 компонент. Симетрії за парами індексів, всередині пар і симетрії властиві конкретній кристалічній системі зменшують кількість незалежних модулів (елементів). Так для триклинної $(1, \bar{1})$ це 126 незалежних елементів; тетрагональної $(4mm, \bar{4}2m, 422, 4/m2/m2/m)$ 25, тригональна $(3m, 32, \bar{3} 2/m)$ 28, гексагональна $(\bar{6}2m, 6mm, 622, 6/m2/m2/m)$ 19, кубічної $(\bar{4}3m, 432, 4/m\bar{3}2/m)$ 11. У дужках вказані точкові групи, для яких знайдені кількості незалежних модулів. [76-78].

Всюди експериментально виміряні модулі пружності подаються в нотації Фойгта, тобто матриці тензора $\lambda_{iklmnpqt}^{(Re)}$ ставиться у відповідність чотиривимірна шестирядна матриця $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ($\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) за наступним правилом перепозначення $(11) \rightarrow 1, (22) \rightarrow 2, (33) \rightarrow 3, (23) \rightarrow 4,$

(13) $\rightarrow 5$, (12) $\rightarrow 6$, або (для візуалізації) проти годинникової стрілки, починаючи з першого елементу: $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$



Знаючи елементи матриці $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$, можемо порахувати згортки у формулах (2.10) і отримати, наприклад, для кристалів кубічної кристалічної системи

$$\begin{aligned}
 D &= \frac{1}{315} (c_{1111} + 32c_{1112} + 36c_{1122} + 204c_{1123} - 132c_{1144} - \\
 &\quad - 24c_{1166} - 312c_{1244} - 36c_{1266} + 240c_{1456} + 6c_{4444} + 12c_{4466}); \\
 E &= \frac{1}{315} (c_{1111} + 14c_{1112} + 9c_{1122} - 3c_{1123} + 21c_{1144} \\
 &\quad - 6c_{1166} + 48c_{1244} - 48c_{1456} - 3c_{4444} - 6c_{4466}); \\
 F &= \frac{1}{630} (2c_{1111} + 10c_{1112} - 9c_{1122} - 24c_{1123} + 6c_{1144} \\
 &\quad + 6c_{1166} + 78c_{1244} + 36c_{1266} - 6c_{1456} - 15c_{4444} - 30c_{4466}); \\
 G &= \frac{1}{630} (2c_{1111} - 8c_{1112} + 27c_{1122} - 42c_{1123} + 96c_{1144} \\
 &\quad + 24c_{1166} + 60c_{1244} - 54c_{1266} - 168c_{1456} + 39c_{4444} + 78c_{4466}).
 \end{aligned} \tag{2.11}$$

Для інших кристалічних систем модулі пружності зведеного ізотропного кристала через модулі реального занесені в таблицю 1.1. Розрахунки проведені для кристалічних систем вищих симетрій, оскільки вони мають меншу міру анізотропії і за своїми властивостями ближче до ізотропного середовища. Крім того, для кристалів цих систем є експериментально виміряні значення модулів пружності 4-го порядку (для таких симетрій як триклинна, моноклінна, ромбічна число різних модулів пружності занадто велике, і виміри не проводилися). Щоб отримати значення D, E, F, G з таблиці, треба помножити коефіцієнти в рядку на відповідні значення модулів реального кристала $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ і скласти.

Табл. 1.1. Коефіцієнти для розрахунку модулів пружності четвертого порядку D, E, F, G для зведених ізотропних кристалів різних сингоній

		множ.	C_{1111}	C_{1112}	C_{1113}	C_{1122}	C_{1123}	C_{1133}	C_{1144}	C_{1155}	C_{1166}	C_{1223}	C_{1233}	C_{1244}
Тетрагональна	D	1/945	2	32	32	36	408	72	-264	-24	-24	—	204	-312
	E	1/945	2	14	14	9	-6	18	42	-6	-6	—	-3	48
	F	1/1890	4	10	10	-9	-48	-18	12	6	6	—	-24	78
	G	1/1890	4	-8	-8	27	-84	54	192	24	24	—	-42	60
Тригональна	D	1/1890	32	—	27	—	416	122	-318	-18	20	413	56	-362
	E	1/3780	28	—	39	—	-5	79	102	-18	34	-23	-8	116
	F	1/15120	40	—	63	—	-182	-140	57	27	124	-215	-20	317
	G	1/7560	26	—	-15	—	-172	248	462	42	56	-169	-46	190
Гексагональна	D	2/945	1	16	16	—	204	36	-132	-12	-12	—	—	—
	E	2/945	1	7	7	—	-3	9	21	-3	-3	—	—	—
	F	1/945	2	5	5	—	-24	-9	6	3	3	—	—	—
	G	1/945	2	-4	-4	—	-42	27	96	12	12	—	—	—
Кубическа	D	1/315	1	32	—	36	204	—	-132	-	-24	—	—	-312
	E	1/315	1	14	—	9	-3	—	21	-	-6	—	—	48
	F	1/630	2	10	—	-9	-24	—	6	-	6	—	—	78
	G	1/630	2	-8	—	27	-42	—	96	-	24	—	—	60
		множ.	C_{1266}	C_{1333}	C_{1344}	C_{1355}	C_{1366}	C_{1456}	C_{2233}	C_{3333}	C_{3344}	C_{4444}	C_{4466}	C_{6666}
Тетрагональна	D	1/945	—	32	-312	-72	-312	480	—	1	—	12	24	—
	E	1/945	—	14	48	—	48	-96	—	1	—	-6	-6	—
	F	1/1890	—	10	78	72	78	-12	—	2	—	-30	-60	—
	G	1/1890	—	-8	60	-108	60	-336	—	2	—	78	156	—
Тригональна	D	1/1890	-336	16	-634	-134	—	—	—	2	-48	12	—	-144
	E	1/3780	-192	14	196	-4	—	—	—	4	-24	-12	—	-112
	F	1/15120	192	20	625	575	—	—	—	16	48	-120	—	-96
	G	1/7560	-348	-8	256	-446	—	—	—	8	96	156	—	-40
Гексагональна	D	2/945	—	16	-156	-36	—	—	36	—	—	6	—	—
	E	2/945	—	7	24	—	—	—	9	—	—	-3	—	—
	F	1/945	—	5	39	36	—	—	-9	—	—	-15	—	—
	G	1/945	—	-4	30	-54	—	—	27	—	—	39	—	—
Кубическа	D	1/315	-36	—	—	—	—	240	—	—	—	6	12	—
	E	1/315	—	—	—	—	—	-48	—	—	—	-3	-6	—
	F	1/630	36	—	—	—	—	-6	—	—	—	-15	-30	—
	G	1/630	-54	—	—	—	—	-168	—	—	—	39	78	—

Табл. 1.2. Значення модулів пружності зведених ізотропних кристалів для різних речовин

10^{11} dyn·cm ⁻²	λ	μ	A	B	C	D	E	F	G
LiF	3,4	5,15	-4,14	-9,48	-7,7	248,5	-73,13	68,7	69,7
NaCl	1,49	1,5	-2,1	-3,3	-3,3	87,5	-26,8	25,5	25,8
MgO	7,04	13,39	-2,5	-15,3	-21,6	347,5	-95,7	66,6	73,5
CaF ₂	6,2	4,2	-21,19	-9,87	-5,81	-13,4	-3,2	4,30	4,5

З використанням експериментально виміряних значень модулів пружності четвертого порядку [79,80], проведені розрахунки в моделі RISM зведених модулів пружності 2-го, 3-го, 4-го порядків для деяких кристалів кубічної сингонії [6]. Результати занесені в таблицю 1.2.

Висновки до розділу 2

У дисертаційній роботі запропоновано спрощений підхід до опису суттєво нелінійних ефектів у кристалічних твердих тілах. Виявляється, що модель зведеного ізотропного кристала більше за інші відповідає реальному кристалу не лише відносно пружних хвиль, які поширюються в ньому, а і будь-яких пружних властивостей взагалі. Якщо відомі значення модулів пружності четвертого порядку для реальних кристалів, то можна визначити значення коефіцієнтів D , E , F , G в моделі зведеного ізотропного кристала, що дозволить розрахувати матричні елементи взаємодії чотирьох фононів $\Phi(1,2;3,4)$, необхідних для опису явищ у кристалах, в яких істотні нелінійні ефекти взаємодії фононів.

Зокрема, в результаті розрахунків в даному розділі дисертаційної роботі було

1. проведено процедуру зведення опису пружних властивостей твердого тіла до ізотропного середовища;
2. здобуто зв'язки між згортками тензора модулів пружності восьмого рангу;
3. розраховано модулі пружності четвертого порядку зведеного ізотропного кристала через згортки тензора модулів пружності реального кристала кубічної кристалічної системи;
4. здобуто формули для модулів пружності четвертого порядку зведеного ізотропного кристала для довільної кристалічної системи.

РОЗДІЛ 3. ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ КРИСТАЛІВ З УРАХУВАННЯМ ГРАТКОВОГО АНГАРМОНІЗМУ

У моделі Дебая збудження середовища є газ невзаємодіючих при будь-якій температурі квазічастинок – фононів. Однак кількість фононів зростає зі збільшенням температури і, отже, взаємодія між ними стає все більш істотною. У розділі модель Дебая узагальнюється на випадок газу фононів, взаємодія між якими враховується в наближенні самоузгодженого поля. Урахування фонон-фононої взаємодії приводить до того, що швидкість таких «самоузгоджених» фононів стає функцією температури і не передбачається заданою, а знаходиться в результаті розв’язання нелінійного алгебраїчного рівняння, яке виводиться з умови мінімуму вільної енергії. «Самоузгоджена» енергія Дебая в даному підході також є функцією температури. Знайдено термодинамічні функції газу таких фононів і, зокрема, обчислена фононна теплоємність. Показано, що в області низьких температурах до кубічного закону в температурній залежності теплоємності з’являється добавка, пропорційна сьомій ступені температури. Це, мабуть, може бути причиною, по якій кубічний закон для теплоємності спостерігається в експерименті тільки при досить низьких температурах. В області високих температур теорія передбачає лінійне за температурою відхилення теплоємності від закону Дюлонга-Пті, що спостерігається експериментально. Матеріали даного розділу опубліковані в [6].

3.1 Самоузгоджений опис газу фононів

Фонони в кристалічній ґратці описуються густиною оператора Гамільтона

$$H(\mathbf{r}) = \frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + U_2(\mathbf{r}) + U_3(\mathbf{r}) + U_4(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

де квадратичні, кубічні члени четвертого порядку по тензору деформації

$$u_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla_j u_i + \nabla_i u_j + \nabla_i u_a \nabla_j u_a) \quad (3.2)$$

мають вигляд

$$U_2 = \frac{1}{2} \lambda_{aibj} u_{ai} u_{bj}; \quad U_3 = \frac{1}{6} \lambda_{aibjck} u_{ai} u_{bj} u_{ck}; \quad U_4 = \frac{1}{24} \lambda_{aibjckdl} u_{ai} u_{bj} u_{ck} u_{dl} \quad (3.3)$$

причому ρ – густина, $u_i(\mathbf{r})$ – вектор деформації, $\pi_a(\mathbf{r}) = \rho \dot{u}_a(\mathbf{r})$ – канонічний імпульс.

При переході до квантового опису канонічними змінними будуть вектор деформації $u_i(\mathbf{r})$ і імпульс $\pi_i(\mathbf{r})$, тому розвинення гамильтоніана (3.1) треба проводити за u_i , а не u_{ij} . Оскільки тензор деформації (3.2) містить окрім лінійних членів, також квадратичні члени по градієнтах вектору деформації $u_i(\mathbf{r})$, то з точністю до доданків четвертого порядку по градієнтах, потенційні енергії (3.3) можна записати у вигляді

$$U_2 = U_2^{(2)} + U_2^{(3)} + U_2^{(4)}, \quad U_3 = U_3^{(3)} + U_3^{(4)},$$

де

$$\begin{aligned} U_2^{(2)} &= \frac{1}{2} \lambda_{aibj} \nabla_i u_a \nabla_j u_a, & U_3^{(3)} &= \frac{1}{6} \lambda_{aibjck} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c, \\ U_2^{(3)} &= \frac{1}{2} \lambda_{aibj} \nabla_i u_a \nabla_j u_c \nabla_b u_c, & U_3^{(4)} &= \frac{1}{4} \lambda_{aibjck} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_s \nabla_c u_s, \\ U_2^{(4)} &= \frac{1}{8} \lambda_{aibj} \nabla_a u_c \nabla_i u_c \nabla_b u_s \nabla_j u_s, \end{aligned}$$

З точністю до величин четвертого порядку по градієнтах вектору деформації густину гамильтоніана набирає вигляду

$$H(\mathbf{r}) = \frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + \frac{1}{2} \lambda_{aibj} \nabla_i u_a \nabla_j u_b + \tilde{U}_3 + \tilde{U}_4, \quad (3.4)$$

де

$$\tilde{U}_3 = \frac{1}{2} \lambda_{aibj} \nabla_i u_a \nabla_j u_c \nabla_b u_c + \frac{1}{6} \lambda_{aibjck} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c,$$

$$\begin{aligned} \tilde{U}_4 = & \frac{1}{8} \lambda_{aibj} \nabla_a u_c \nabla_i u_c \nabla_b u_s \nabla_j u_s + \frac{1}{4} \lambda_{aibjck} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_s \nabla_c u_s + \\ & + \frac{1}{24} \lambda_{aibjckdl} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c \nabla_l u_d. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Повний гамільтониан $H = \int H(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ є сума гамільтоніанів вільних фононів і їх взаємодії $H = H_0 + H_I$, де

$$H_0 = \int \left[\frac{\pi_a(\mathbf{r})^2}{2\rho} + \frac{1}{2} \lambda_{aibj} \nabla_i u_a \nabla_j u_b \right] d\mathbf{r}, \quad H_I = \int [\tilde{U}_3(\mathbf{r}) + \tilde{U}_4(\mathbf{r})] d\mathbf{r} \quad (3.5)$$

Модулі пружності, взагалі кажучи, є функціями температури, але тут, як і в стандартній моделі Дебая, будемо цим нехтувати, також як і відмінністю між ізотермічними і адіабатичними модулями, і врахуємо згодом тільки температурну залежність спостережуваних величин, пов'язану зі збудженням фононів.

3.1.1. Перенормування фононів

Для опису системи взаємодіючих фононів, використовуємо метод самоузгодженого поля у формулюванні моделі, розвиненої в [44] для ферміонних і в [81, 82] для бозонних систем. На прикладі ангармонічного осцилятора реалізація цього підходу продемонстрована в [83, 84]. Особливість запропонованого формулювання проявляється в тому, що в ньому модель самоузгодженого поля вводиться не на рівні рівнянь руху, а на рівні гамільтоніана. Це дозволяє досягти виконання усіх термодинамічних співвідношень у рамках моделі самоузгодженого поля. У використовуваному підході повний гамільтоніан представляється у вигляді суми двох доданків

$$H = H_s + H_c. \quad (3.6)$$

Тут апроксимуючий самоузгоджений гамільтоніан

$$H_s = \int \left[\frac{\pi_a^2}{2\rho} + \frac{\tilde{\lambda}}{2} \nabla_i u_a \nabla_i u_a \right] d\mathbf{r} + \varepsilon_0 \quad (3.7)$$

описує нові "вільні" фонони з перенормованною швидкістю, а кореляційний гамільтоніан

$$H_C = \int \left[\frac{1}{2} (\lambda_{aibj} - \tilde{\lambda} \delta_{ij} \delta_{ab}) \nabla_i u_a \nabla_j u_b + \tilde{U}_3 + \tilde{U}_4 \right] d\mathbf{r} - \varepsilon_0 \quad (3.8)$$

описує взаємодію таких фононів. Самоузгоджений гамільтоніан (3.7) містить єдиний ефективний модуль пружності $\tilde{\lambda}$ і описує фононну систему в ізотропному наближенні, коли фонони з довільною поляризацією мають однакову швидкість. Крім того, H_S включає доданок ε_0 , що не містить операторів, облік якого є істотним, оскільки він описує зміну основного стану при переході від точного гамільтоніана до самоузгодженого. Таким чином, за допомогою перенормування модуля пружності головно взаємодія між початковими фононами в ізотропному наближенні враховується в гамільтоніані (3.7), а гамільтоніан (3.8) описує залишкову взаємодію, не включену в модель самоузгодженого поля.

При квантовому описі вектор деформації і канонічний імпульс слід розглядати як оператори, для яких справедливі відомі співвідношення комутації

$$\begin{aligned} \pi_a(\mathbf{r}) u_b(\mathbf{r}') - u_b(\mathbf{r}') \pi_a(\mathbf{r}) &= -i\hbar \delta_{ab} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ u_a(\mathbf{r}) u_b(\mathbf{r}') - u_b(\mathbf{r}') u_a(\mathbf{r}) &= 0, \quad \pi_a(\mathbf{r}) \pi_b(\mathbf{r}') - \pi_b(\mathbf{r}') \pi_a(\mathbf{r}) = 0. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Скористаємося розкладанням польових операторів:

$$\begin{aligned} u_a(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega(\mathbf{k}, \alpha)}} e_a(\mathbf{k}, \alpha) (b_{\mathbf{k}\alpha} + b_{-\mathbf{k}\alpha}^+) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \\ \pi_a(\mathbf{r}) &= -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \sqrt{\frac{\rho\hbar\omega(\mathbf{k}, \alpha)}{2}} e_a(\mathbf{k}, \alpha) (b_{\mathbf{k}\alpha} - b_{-\mathbf{k}\alpha}^+) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

де $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \alpha)$ – комплексні вектори поляризації ($\alpha = 1, 2, 3$), такі що $\mathbf{e}^*(\mathbf{k}, \alpha) = \mathbf{e}(-\mathbf{k}, \alpha)$, для яких виконані умови ортогональності і повноти

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \alpha) \mathbf{e}^*(-\mathbf{k}, \alpha') = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad \sum_{\alpha} \mathbf{e}_i^*(\mathbf{k}, \alpha) \mathbf{e}_j(\mathbf{k}, \alpha) = \delta_{ij}.$$

Самоузгоджений гамільтоніан (3.7) в поданні операторів народження і знищення фононів $b_{k\alpha}^+$ і $b_{k\alpha}$, які підпорядковуються стандартним співвідношенням комутації $[b_{k\alpha}, b_{k'\alpha'}^+] = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'}$, $[b_{k\alpha}, b_{k'\alpha'}] = [b_{k\alpha}^+, b_{k'\alpha'}^+] = 0$ приймає діагональний вид

$$H_S = \hbar \sum_{k,\alpha} \omega(k) b_{k\alpha}^+ b_{k\alpha} + \frac{3}{2} \hbar \sum_k \omega(k) + \varepsilon_0, \quad (3.10)$$

де $\omega(k) = c_s k$, $c_s = \sqrt{\tilde{\lambda}/\rho}$ — швидкість фононів з довільною поляризацією. Надалі обчислення середніх величин будемо проводити за допомогою статистичного оператора

$$\hat{\rho} = \exp \beta (F - H_S), \quad (3.11)$$

де $\beta = 1/T$ — зворотна температура. Умова нормування $Sp \hat{\rho} = 1$ призводить до формули для вільної енергії системи, описуваної гамільтоніаном (3.10), в моделі самоузгодженого поля

$$F = \varepsilon_0 + \frac{3\hbar}{2} \sum_k \omega(k) + 3T \sum_k \ln(1 - e^{-\beta \hbar \omega(k)}). \quad (3.12)$$

Енергія недеформованого стану ε_0 знаходиться з умови рівності середніх для точного і апроксимуючого гамільтоніанів $\langle H \rangle = \langle H_S \rangle$, або що те ж саме $\langle H_C \rangle = 0$. Це дає

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} \int \left[(\lambda_{aibj} - \tilde{\lambda} \delta_{ij} \delta_{ab}) \langle \nabla_i u_a \nabla_j u_b \rangle \right] d\mathbf{r} + \int \left[\langle \tilde{U}_3 \rangle + \langle \tilde{U}_4 \rangle \right] d\mathbf{r} \quad (3.13)$$

Обчислюючи середнє в (3.13) за допомогою статистичного оператора (3.11),

$$\begin{aligned} \langle \nabla_i u_a \nabla_j u_b \rangle &= \frac{\hbar}{2\rho V} \delta_{ab} \sum_k \frac{k_i k_j \lambda_{aiaj}}{\omega(k)} (2f_k + 1), \quad \langle \tilde{U}_3(\mathbf{r}) \rangle = 0, \\ \langle \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_c \nabla_l u_d \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\rho V} \right)^2 \sum_{k_1, k_2} \frac{(2f_{k_1} + 1)(2f_{k_2} + 1)}{\omega(k_1)\omega(k_2)} \{ \delta_{ab} \delta_{cd} k_{1i} k_{1j} k_{2k} k_{2l} + \\ &\quad + k_{1i} k_{1k} k_{2j} k_{2l} \delta_{ac} \delta_{bd} + k_{1i} k_{1l} k_{2k} k_{2j} \delta_{ad} \delta_{bc} \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \nabla_i u_a \nabla_j u_b \nabla_k u_s \nabla_c u_s \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2\rho V} \right)^2 \delta_{ab} \sum_{k_1, k_2} \frac{(2f_{k_1} + 1)(2f_{k_2} + 1)}{\omega(k_1)\omega(k_2)} \{ 3k_{1i}k_{1j}k_{2k}k_{2c} + \\ &\quad + k_{1i}k_{1k}k_{2j}k_{2c} + k_{1i}k_{1c}k_{2k}k_{2j} \}, \\ \langle \nabla_a u_c \nabla_i u_c \nabla_b u_s \nabla_j u_s \rangle &= 3 \left(\frac{\hbar}{2\rho V} \right)^2 \sum_{k_1, k_2} \frac{(2f_{k_1} + 1)(2f_{k_2} + 1)}{\omega(k_1)\omega(k_2)} \{ 3k_{1i}k_{1a}k_{2b}k_{2j} + \\ &\quad + k_{1i}k_{1b}k_{2a}k_{2j} + k_{1i}k_{1j}k_{2a}k_{2b} \},\end{aligned}$$

приходимо до наступної формули

$$\varepsilon_0 = \frac{3\hbar}{2c_s} \left[\frac{1}{3\rho} \sum_k \frac{k_i k_j \lambda_{aij}}{k} \left(f_k + \frac{1}{2} \right) - c_s^2 \sum_k k \left(f_k + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{\hbar^2}{8V\rho^2 c_s^2} I, \quad (3.14)$$

де

$$\begin{aligned}I \equiv \sum_{k_1, k_2} \frac{(f_{k_1} + 1/2)(f_{k_2} + 1/2)}{k_1 k_2} &\{ \lambda_{aij bkl} k_{1i} k_{1j} k_{2k} k_{2l} + \\ &+ 2\lambda_{aijck} [3k_{1i} k_{1j} k_{2k} k_{2c} + 2k_{1i} k_{1k} k_{2j} k_{2c}] + 3\lambda_{aibj} [3k_{1i} k_{1a} k_{2b} k_{2j} + 2k_{1i} k_{1b} k_{2a} k_{2j}] \},\end{aligned} \quad (3.15)$$

а $f_k = [e^{\beta\hbar\omega(k)} - 1]^{-1}$ — функція розподілу фононів. Перенормовану внаслідок взаємодії швидкість фононів c_s знайдемо з умови мінімуму вільної енергії (3.12) $\partial F / \partial c_s = 0$. У результаті приходимо до нелінійного рівняння для визначення швидкості «нових» фононів

$$c_s^2 = \frac{2\pi^2}{3\rho V} J^{-1} \sum_k \frac{k_i k_j \lambda_{aij}}{k} \left(f_k + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar\pi^2}{6\rho^2 V^2 c_s} \frac{I}{J} \quad (3.16)$$

де $J = \int_0^{k_D} \left(f_k + \frac{1}{2} \right) k^3 dk$, а верхньою межею в інтегралі є хвильове число Дебая

$k_D = (6\pi^2 N/V)^{1/3}$ [85]. Рівняння (3.16) справедливо для самоузгодженого опису нелінійних властивостей кристалів довільної симетрії.

За відсутності взаємодії, нехтуючи нелінійними ефектами, фонони в даній теорії такі ж, як в теорії Дебая. Їх природно назвати «голими» або «дебаєвськими». Фонони, швидкість яких перенормована внаслідок взаємодії відповідно до (3.16), будемо називати «самоузгодженими». Навіть в разі

нехтування залежністю модулів λ_{aiqj} від температури, що передбачається в звичайній теорії Дебая, перенормована швидкість c_s в даному підході істотно залежить від температури, оскільки виражається через інтеграли від функції розподілу. В даному підході, параметр $\tilde{\lambda}$ вибирається так, що гамільтоніан (3.7) виявляється максимально близьким точному гамільтоніану $H = H_0 + H_I$ і тому з найкращим наближенням описує фононну систему при апроксимації її квадратичним гамільтоніаном [86]

3.1.2. Наближення ізотропного середовища

Розрахунок перенормованої швидкості (3.16) і термодинамічних коефіцієнтів нелінійного кристала конкретної симетрії є досить складною і громіздкою процедурою, яку слід проводити для кристалів кожного класу окремо. У багатьох випадках властивості кристала якісно, а за не дуже сильною анізотропією і кількісно, можуть бути описані в наближенні ізотропного середовища, як показано в розділі 2. У цьому випадку, підставляючи в (3.15) тензори модулів пружності (2.3), (2.4) і (2.9), згортки $\mathbf{k}$ і λ можуть бути легко розрахованими; залишаються складові двох типів: пропорційні $k_1^2 k_2^2$ і $(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2)^2$. Величина I спроститься до:

$$I \equiv \sum_{k_1, k_2} \frac{(f_{k_1} + 1/2)(f_{k_2} + 1/2)}{k_1 k_2} \left[V_0 k_1^2 k_2^2 + V_1 (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2)^2 \right], \quad (3.17)$$

де

$$\begin{aligned} V_0 &= 9\lambda + 6\mu + 6A + 32B + 32C + D + 8E + 8F + 18G, \\ V_1 &= 6\lambda + 24\mu + 4A + 48B + 88C + 8E + 40F + 10G. \end{aligned} \quad (3.18)$$

З урахуванням цих співвідношень, після інтегрування по кутах в (3.17), приходимо до наступного рівняння, що визначає швидкість самоузгоджених фононів в ізотропного пружного середовищі

$$c_s^2 = c_0^2 + \frac{\hbar}{24\pi^2 \rho^2 c_s} \left(V_0 + \frac{V_1}{3} \right) J, \quad (3.19)$$

де усереднена швидкість «голих» фононів c_0 визначена формулою

$$c_0^2 = \frac{1}{3}(2c_t^2 + c_l^2) = \frac{(\lambda + 4\mu)}{3\rho}, \quad (3.20)$$

а поздовжня і поперечна швидкості звуку визначаються відомими співвідношеннями $c_l^2 = (\lambda + 2\mu)/\rho$, $c_t^2 = \mu/\rho$ [72]. Відзначимо, що визначення (33) відрізняється від визначення середньої швидкості c_D за Дебаєм (2.1) (записуючи через модулі пружності):

$$\frac{1}{c_D^3} = \rho^{3/2} \left[\frac{2}{\mu^{3/2}} + \frac{1}{(\lambda + 2\mu)^{3/2}} \right]. \quad (3.21)$$

У теорії, де середня швидкість або енергія Дебая є феноменологічними параметрами, ця різниця у визначенні не має істотного значення. Однак, оскільки середні швидкості (3.20) і (3.21) по-різному виражаються через модулі пружності, при більш детальному описі цю різницю слід враховувати. Стандартна енергія Дебая визначається співвідношенням $\Theta_D \equiv \hbar c_D k_D$ [85], але в даному підході, як видно з формули (3.19), природним є визначення $\Theta_0 \equiv \hbar c_0 k_D$, яке будемо використовувати. Оскільки тепер крім швидкості «голих» фононів c_0 виникає швидкість самоузгоджених фононів c_s , природно також визначити «самоузгоджену енергію Дебая» $\tilde{\Theta}_D \equiv \hbar c_s k_D$, яка, на відміну від стандартного визначення енергії Дебая Θ_D або Θ_0 , є функцією температури. Відзначимо, однак, що хоча в своєму початковому формулюванні енергія Дебая передбачається не залежною від температури, на практиці експериментальні дані часто представляють у вигляді функції енергії Дебая від температури [87-89]. У розглянутому підході самоузгоджена енергія Дебая $\tilde{\Theta}_D$ істотно залежить від температури внаслідок фонон-фононної взаємодії вже в рамках самої теорії і, отже, даний підхід краще відображає реальну ситуацію. Хоча, звичайно, недоліки теорії Дебая, пов'язані з дуже спрощеним вибором спектральної густини, що не враховує деталі будови ґратки, залишаються і в пропонованому підході.

Для компактного представлення результатів визначимо узагальнені

функції Дебая

$$D_n(x) = \frac{n}{x^n} \int_0^x \frac{z^n dz}{e^z - 1}, \quad (n \geq 1) \quad (3.22)$$

Фактично ці функції згодом знадобляться тільки при $n = 1, 2, 3$. Стандартна функція Дебая в таких позначеннях є $D_3(x)$ [44]. Функції (3.22) можуть бути представлені у вигляді

$$D_n(x) = \frac{n}{x^n} \left[n! \zeta(n+1) - \sum_{m=0}^{\infty} \int_x^{\infty} e^{-(m+1)z} z^n dz \right],$$

так що при $x \gg 1$ з точністю до експоненціально малих членів

$$D_1(x) \approx \frac{\pi^2}{6x}, \quad D_2(x) \approx \frac{4}{x^2} \zeta(3), \quad D_3(x) \approx \frac{\pi^4}{5x^3},$$

$\zeta(3) \approx 1,202$ – дзета-функція Рімана. При $x \ll 1$:

$$D_n(x) \approx 1 - \frac{n}{2(n+1)} x + \frac{n}{12(n+2)} x^2.$$

Крім того, нижче будемо використовувати функцію

$$\Phi(x) \equiv 1 + \frac{8}{3x} D_3(x),$$

та її асимптоти

$$\Phi(x) \approx \frac{8}{3x} + \frac{2}{15} x, \quad (x < 1), \quad \Phi(x) \approx 1 + \frac{8\pi^4}{15x^4}, \quad (x \gg 1).$$

Для подальшого зручно ввести позначення σ для відношення перенормованної внаслідок фонон-фононної взаємодії швидкості звуку c_s до початкової середньої швидкості звуку c_0 , або, що теж, відношення самоузгодженої енергії Дебая до стандартної:

$$\sigma \equiv c_s/c_0 = \tilde{\Theta}_D/\Theta_0. \quad (3.23)$$

Рівняння (3.19), з урахуванням введених позначень (3.23), можна записати в безрозмірному вигляді

$$(\sigma^2 - 1)\sigma = \Lambda \Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right), \quad (3.24)$$

де $\tau \equiv T/\Theta_0$ – безрозмірна температура. Було враховано, що $J = \frac{k_D^4}{8} \Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right)$. У рівняння (3.24) входить єдиний безрозмірний параметр, що містить характеристики системи

$$\Lambda \equiv \frac{\Theta_0}{32\rho M c_0^4} \left(V_0 + \frac{V_1}{3} \right) \quad (3.25)$$

M – маса атома решітки. Його будемо називати параметром анізотропії середовища.

3.2. Вплив нелінійності на термодинаміку. Розрахунки теплоємності

Знак Λ визначає два якісно різні поведінки термодинамічних величин при високих температурах, де концентрація фононів може перевищувати концентрацію атомів речовини. Взагалі кажучи, відсутні будь-які обмеження на знак цього параметра. Використання даних робіт [79,90] по вимірюванню модулів пружності четвертого порядку, а також значень густини ρ і маси атома M , дозволило розрахувати параметри узагальненої теорії Дебая для самоузгоджених фононів кристалів кубічної симетрії, які наведені в таблиці 1.1. Для більшості речовин знак Λ виявляється позитивним. Це призводить до того, що в більшості випадків швидкість фононів c_s і самоузгоджена енергія Дебая $\tilde{\Theta}_D$ зростають з температурою [42]. Алмаз і кристали з подібною структурою, такі як германій та кремній, характерні тим, що для них цей параметр виявляється негативним.

Прояснимо вплив знака Λ на термодинаміку на прикладі розрахунку ізохоричної теплоємності алмазу і хлориду натрію, і подальшому порівнянні з експериментально виміряною поведінкою теплоємності цих речовин при високих температурах.

Таблиця 3.1. Значення параметрів V_0 , V_1 (3.18) и Λ (3.25), що визначають нелінійні властивості кристала.

	V_0 ,	V_1 ,	Λ
Diamond	-1784.98	-2030.2	-0.00817
Ge	-3864,39	-3859,8	-0,00652
Si	-10806,1	-9443,8	-0,02096
LiF	955,62	1854,24	0,012338
LiCl	458,66	897,16	0,009661
LiBr	466,2189	917,72	0,007509
LiI	569,4414	1127,012	0,010911
NaF	203,4814	450,42	0,002949
NaCl	339,9751	650,108	0,007006
NaBr	333,8131	647,376	0,006325
NaI	193,7943	382,32	0,00449
KF	52,32071	95,462	0,000677
KCl	147,2366	273,976	0,003106
KBr	125,5149	243,904	0,00232
KI	126,3815	247,9544	0,002288
RbF	190,4814	390,092	0,002832
RbCl	130,3207	258,182	0,019271
RbBr	121,6149	235,468	0,002035
RbI	109,3709	213,5984	0,001799
CaO	213,3406	211,56	0,000409
SrO	230,6329	320,584	0,002491
BaO	157,6254	263,616	0,000448
MgO	386,1686	350,88	0,000692
CsCl	166,3986	586,1	0,01478
CsBr	20,79071	173,266	0,002889
CsI	140,5477	455,108	0,011728
TlCl	20,77757	372,134	0,007863
TlBr	28,31914	382,976	0,006291
CaF ₂	-471,797	-739,32	-0,00162
SrF ₂	-322,069	-468,016	-0,00114
BaF ₂	-228,346	-182,36	-0,00069
AgCl	65,53571	192,724	0,001237
AgBr	59,39423	168,6856	0,000701
PbS	95,23714	130,756	0,003692
PbSe	30,56714	1,496	0,001104
PbTe	81,846	84,712	0,007874
SnTe	161,2409	215,676	0,031719

Для розрахунку параметра нелінійності незалежні компоненти тензорів пружності четвертого, шостого та восьмого рангів (в нотації Фойгта) взяті з [79, 91] для NaCl і з [88,89] для алмазу. Наведені в таблицях 3.2, 3.3.

Таблиця 3.2. Незалежні компоненти тензорів пружності четвертого і шостого рангу (в $10^{11} \text{ dyn}\cdot\text{cm}^{-2}$)

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{111}	C_{112}	C_{155}	C_{123}	C_{144}	C_{456}
Diamond	108	12.4	57.8	-761	-226	-280	210	-178	-82.0
NaCl				-84	-5	-6	4,6	2,9	2,6

Таблиця 3.3. Незалежні компоненти тензора пружності восьмого рангу (в $10^{11} \text{ dyn}\cdot\text{cm}^{-2}$)

	C_{1111}	C_{1112}	C_{1166}	C_{1122}	C_{1266}	C_{4444}	C_{1123}	C_{1144}	C_{1244}	C_{1456}	C_{4466}
Diam.	2669	946	1074	607	819	1132	-42.5	-138.5	-26.4	48.7	52.8
NaCl	1204	97,1	107	102	111	112	-4,78	-5,63	-6,06	-6,48	-4,23

За допомогою даних, наведених в таблицях вище, за формулами для модулів пружності 2-го і 3-го порядку [75]

$$\lambda = \frac{1}{5}(c_{11} + 4c_{12} - 2c_{44}), \quad \mu = \frac{1}{5}(c_{11} - c_{12} + 3c_{44}),$$

$$A = \frac{1}{35}(c_{111} + 18c_{112} + 16c_{123} - 30c_{144} - 12c_{155} + 16c_{456}),$$

$$B = \frac{1}{35}(c_{111} + 4c_{112} - 5c_{123} + 19c_{144} + 2c_{155} - 12c_{456}),$$

$$C = \frac{1}{35}(c_{111} - 3c_{112} + 2c_{123} - 9c_{144} + 9c_{155} + 9c_{456}),$$

і формулами (2.11) отримано значення коефіцієнтів пружності зведеного ізотропного кристала для алмазу і хлориду натрію (таблиця 3.4).

Таблиця 3.4. Дев'ять наведених модулів пружності (в $10^{11} \text{ dyn}\cdot\text{cm}^{-2}$)

	λ	μ	A	B	C	D	E	F	G
Diam	8.4	53.8	169.1	-162.1	-37.7	637.5	186.8	-280.3	183.9
NaCl	1,49	1,498	-	-	-	87,45	25,51	-26,77	25,81

Далі за формулою (3.25) з використанням матеріальних характеристик кристалів отримуємо для алмазу $\Lambda = -0.00817$, для хлориду натрію $\Lambda = 0,007006$. Параметри Λ для інших речовин в табл. 3.1 отримані аналогічним чином.

Урахування фонон-фононої взаємодії привело до появи залежності середньої швидкості фононів від температури (3.19), (3.24) навіть якщо в лінійному наближенні така залежність була відсутня. На рисунку 3.1 показана температурна залежність швидкості самоузгоджених фононів і енергії Дебая алмазу, розрахована з параметром нелінійності $\Lambda < 0$.

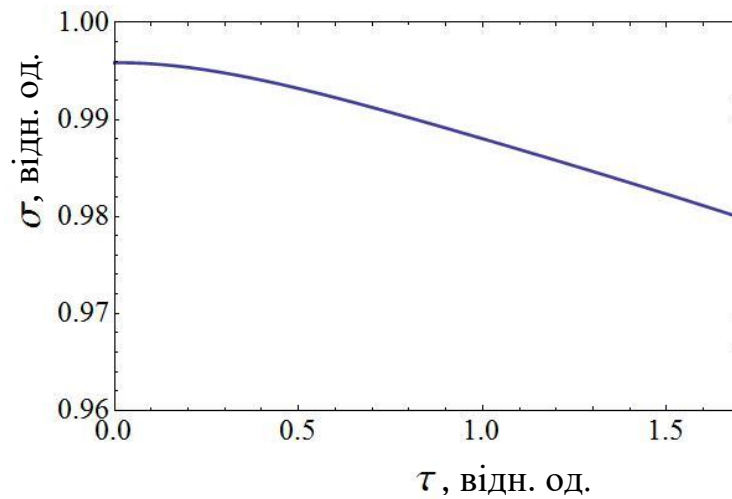


Рис. 3.1. Залежність швидкості самоузгоджених фононів і енергії Дебая алмаза $\sigma \equiv c_s/c_0 = \tilde{\Theta}_D/\Theta_0$ від температури $\tau \equiv T/\Theta_0$. $\Lambda = -0.00817$

Для обчислення теплоємності вільна енергія (3.12) може бути представлена у вигляді

$$\frac{F}{N\Theta_D} = \frac{9}{16} \frac{(1-\sigma^2)}{\sigma} \Phi\left(\frac{\sigma}{\tau}\right) + \frac{9}{32} \frac{\Lambda}{\sigma^2} \Phi^2\left(\frac{\sigma}{\tau}\right) + \frac{9}{8} \sigma + \tau \left[3 \ln(1 - e^{-\sigma/\tau}) - D_3\left(\frac{\sigma}{\tau}\right) \right].$$

Ентропія може бути отримана за відомою формулою $S = -(\partial F/\partial T)_V$, причому при диференціюванні, в силу умови $\partial F/\partial c_s = 0$, швидкість c_s диференціювати не слід:

$$S = -N \left[3 \ln \left(1 - e^{-\frac{\sigma}{\tau}} \right) - 4 D \left(\frac{\sigma}{\tau} \right) \right]. \quad (3.26)$$

З виразу для ентропії (3.26) випливає формула для ізохоричної теплоємності $C_V = T(\partial S / \partial T)_V$:

$$C_V = 3N \left[4 \frac{\tau}{\sigma} D \left(\frac{\sigma}{\tau} \right) - \frac{3}{e^{\sigma/\tau} - 1} \right] \left(\frac{\sigma}{\tau} - \frac{d\sigma}{d\tau} \right). \quad (3.27)$$

Похідну від параметра σ по температурі, що входить в (3.27), можна знайти з рівняння (3.24).

$$\frac{\sigma}{\tau} - \frac{d\sigma}{d\tau} = \frac{\sigma}{\tau} \cdot \frac{(1 - 3\sigma^2)}{1 - 3\sigma^2 + \frac{8}{3} \frac{\Lambda}{\sigma} \left[\frac{3}{e^{\sigma/\tau} - 1} - 4 \frac{\tau}{\sigma} D_3 \left(\frac{\sigma}{\tau} \right) \right]}$$

Графіки, наведені на рисунках 3.2, 3.3, побудовані по (3.27) для алмазу і NaCl. Вони вказують на якісну відмінність поведінки ізохоричної теплоємності при високих температурах для Λ з протилежними знаками.

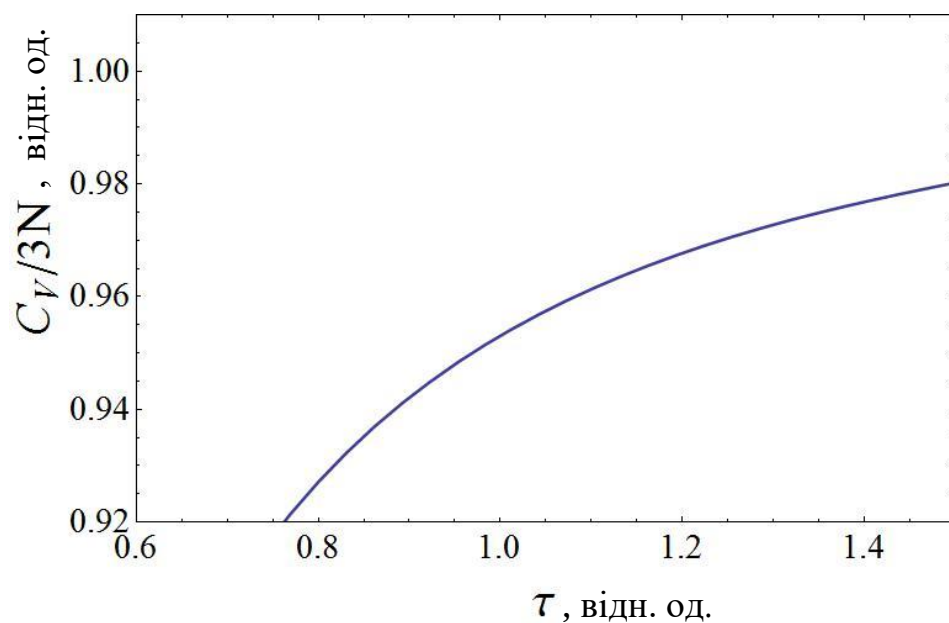


Рис. 3.2. Нормована теплоємність алмазу при постійному об'ємі, побудована за формулою (3.27), ($\Lambda = -0.00817$). Верхня межа температури обмежена температурою плавлення.

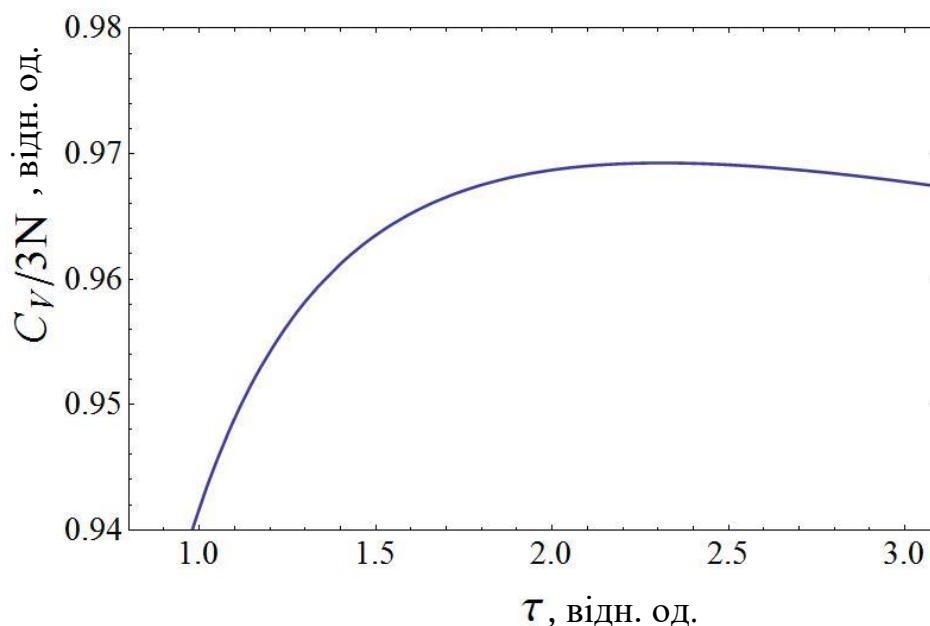


Рис. 3.3. Нормована теплоємність NaCl при постійному об'ємі, побудована за формулою (3.27), ($\Lambda = 0.007$).

Як відомо, в теорії Дебая виконується закон відповідних станів, що складається в тому, що теплоємність є функцією безрозмірної температури $\tau = T/\Theta$ [92]. Урахування фонон-фононної взаємодії приводить до порушення цього закону, і кожна конкретна фононна система додатково характеризується своїм безрозмірним параметром Λ . Для хлориду натрію, як і для більшості речовин, він позитивний. Наслідком цього є зростання з температурою швидкості самоузгоджених фононів [86] і лінійне по температурі відхилення від закону Дюлонга-Пті теплоємності C_V в сторону її зменшення. Для алмазу і деяких інших алмазоподібних кристалів параметр Λ виявився негативним, так що для них швидкість фононів і енергія Дебая з температурою зменшується (рис. 3.1), а теплоємність C_V в високо-температурній області зростає.

Поведінка теплоємності алмазу при високих температурах відрізняється від поведінки теплоємності більшості кристалів іншої симетрії. Тут слід розрізняти теплоємності при постійному об'ємі C_V (ізохорична) і теплоємність при постійному тиску C_p (ізобарична). Ізохорична

теплоємність є більш фундаментальною величиною [72], але в експерименті зазвичай визначають ізобаричну теплоємність. У межі високих температур у відповідність до закону Дюлонга-Пті [92]

$$C_V = 3N \left[1 - \frac{1}{20} \left(\frac{\Theta_D}{T} \right)^2 \right] \quad (3.28)$$

ізохорична теплоємність наближається до постійної величини. Різниця теплоємностей в високотемпературній межі пропорційна температурі [92]:

$$C_p - C_V = 9n^2 \gamma_T \Gamma^2 V T, \quad (3.29)$$

де $n = N/V$ — густина кількості частинок, $\Gamma = \partial \ln \Theta / \partial \ln n$ — параметр Грюнейзена, $\gamma_T = n^{-1} (\partial n / \partial p)_T$ — коефіцієнт ізотермічної стисливості. Таким чином, формула (3.29) дозволяє знайти ізохоричну теплоємність по вимірюваній ізобаричній теплоємності і величинам n , Γ , γ_T .

На рис. 3.4 показана температурна залежність ізохоричної теплоємності алмазу, побудована на основі експериментальних даних робіт [93,94].

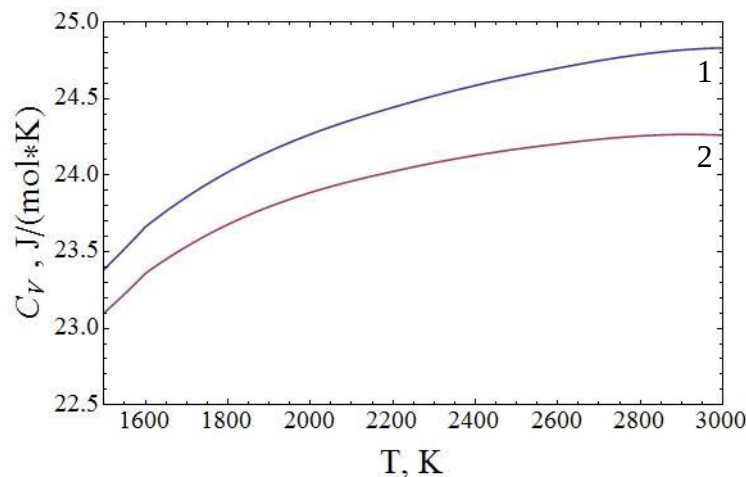


Рис. 3.4. Молярна теплоємність алмазу при постійному об'ємі: (1) побудована за експериментальними даними; (2) з урахуванням формули (3.29).

На рисунку 3.5 показано поведінку ізохоричної теплоємності NaCl при високих температурах, типову для більшості речовин. Експериментальні дані взяті з роботи [95].

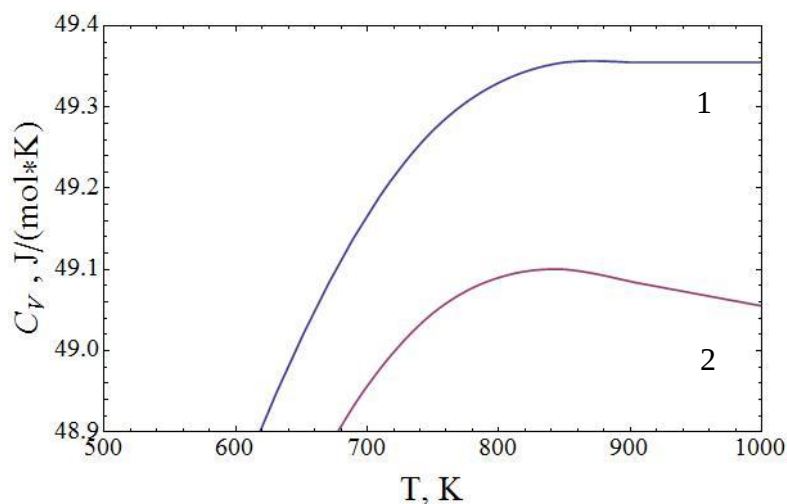


Рис. 3.5. Молярна теплоємність NaCl при постійному об'ємі: (1) побудована за експериментальними даними; (2) з урахуванням формули (3.29).

Як бачимо, C_V алмаза при високих температурах зростає, що відрізняється від поведінки цієї величини у більшості речовин (рис. 3.4, 3.5). Це якісно узгоджується з розрахунками на основі запропонованої теорії (рис. 3.2, 3.3), де враховується взаємодія фононів. Відзначимо, що спроба пояснити відхилення поведінки теплоємності алмазу від закону Дюлонга - Пті при високих температурах була зроблена в роботі [96]. Запропоноване в [96] пояснення засноване на виборі ангармонічного потенціалу взаємодії атомів, аналогічно тому, як це має місце в двоатомній молекулі.

Висновки до розділу 3

Найбільш просто термодинамічні властивості діелектричних кристалів можуть бути описані в моделі Дебая. У цьому наближенні кристал розглядається як суцільне пружне ізотропне середовище, коливання в якій поширюються з середньою швидкістю c_D . При температурах порядку та

вище температури Дебая Θ_D густина фононів перевищує густину кількості частинок в кристалі, і за такої високої густини починають проявлятися нелінійні ефекти, зумовлені взаємодією фононів.

У даному розділі наведено узагальнення моделі Дебая, що враховує фонон-фононну взаємодію в рамках моделі самоузгодженого поля. Зокрема, в результаті проведених розрахунків було здобуто

1. параметр нелінійності для речовин з ґраткою кубічної кристалічної системи, що характеризує вплив взаємодії фононів на термодинамічні величини. Для більшості твердих тіл Λ позитивний, для алмазу, германію, кремнію – негативний.
2. середня швидкість самоузгоджених фононів. Для $\Lambda > 0$ вона зростає з температурою, у протилежному випадку спадає.
3. теплоємність C_V кристалів в області високих температур. Для неї знайдено лінійну за температурою поправку до закону Дюлонга–Пті.

РОЗДІЛ 4. ДРУГИЙ ЗВУК У КРИСТАЛАХ

Для деяких кристалів експериментально було встановлено, що коефіцієнт теплопровідності має максимум в низькотемпературній області [97-99]. Найбільш яскраво максимум проявляється для кристалів алмазу [100, 101], оскільки у нього найбільша температура Дебая серед всіх кристалів. Таку особливість поведінки коефіцієнта теплопровідності якісно можна пояснити [102] залучаючи до розгляду лише нормальні процеси взаємодії фононів, тобто такі для яких виконується закон збереження квазіімпульса. При цьому максимум нескінченний. Для реалістичного опису необхідне урахування резистивних процесів, без збереження квазіімпульса. До них відносять процеси перекиду, розсіювання фононів на домішках, ізотопах, границі кристала. В області низьких температурах роль резистивних процесів зменшується, оскільки $\tau_N \ll \tau_R$. Відкривається можливість поширенню слабо-загасаючих теплових хвиль, так званих хвиль другого звуку (ХДЗ). Припущення про можливість існування подібних хвиль в твердих тілах було висловлено Пєшковим [22], який вперше спостерігав ХДЗ у надплинному гелії.

Теоретично ХДЗ в твердих тілах вивчалися в ряді робіт [24,25,28,29]. В роботі [28] вперше була знайдена область існування ХДЗ, так зване "вікно". Експериментально ХДЗ спостерігалися тільки в деяких кристалах: в твердому гелії [32], NaF [34], вісмуті [36] і сапфірі [37]. Неможливість спостереження ХДЗ в інших кристалах пов'язана з сильним загасанням цих хвиль на домішках і ізотопах. Таким чином, в чистих ідеальних монокристалах основний внесок в загасання хвиль другого звуку буде давати ізотопічні розсіювання фононів. Сучасні технології дають можливість отримувати ізотопічно чисті ідеальні монокристали. Виникає задача знаходження таких концентрацій ізотопів, при яких вони не впливають на поширення ХДЗ, або вплив незначний. Цю задачу можна вирішити, використовуючи модель зведеного ізотропного кристала (розділ 2), або

використовуючи значення частот зіткнень фононів в моделі Каллавея при описі експериментальних даних по теплопровідності [2,5].

4.1. N- і R-процеси

При розрахунку макроскопічних характеристик речовини основний внесок в інтеграл дають теплові фонони $c\hbar k \sim k_B T$. При низьких температурах хвильові вектори фононів в тричастковому процесі будуть переважно залишатися в зоні Брілюєна (рис. 4.1 (a)). Процеси перекидання, коли результуючий вектор виходить за межі зони Брілюєна (рис. 4.1 (b)), будуть відносно рідкісними. А саме, в ймовірності процесу перекидання присутній фактор заселеності

$$\begin{aligned} & (N(k_1)+1)(N(k_2)+1)N(k_3) - (N(k_3)+1)N(k_1)N(k_2) = \\ & = N_1(N_3 - N_2) + (N_2 + 1)N_3 \end{aligned}$$

вважаючи заселеність мод з k_2 і k_3 рівноважними з

$$N_{2,3}^0 \equiv N^0(k_{2,3}) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{2,3}/k_B T) - 1}$$

з огляду на закон збереження енергії $\omega_1 + \omega_2 = \omega_3$, отримують для фактора заселеності

$$(N_1 - N_1^0)(N_3^0 - N_2^0) \quad (4.1)$$

При низьких температурах

$$N_2^0 \sim \exp\left(-\frac{\hbar\omega_2}{k_B T}\right).$$

а ω_1 вважається малою. Тоді із закону збереження $\omega_3 \approx \omega_2$, а фактор заселеності (4.1) набуває вигляду

$$-(N_1 - N_1^0) \frac{\hbar\omega_1}{k_B T} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_2}{k_B T}\right)$$

Тобто при низьких температурах час релаксації за рахунок процесів перекидання велике $\tau_N \ll \tau_U$. Таким чином при низьких температурах переважаючими є нормальні процеси.

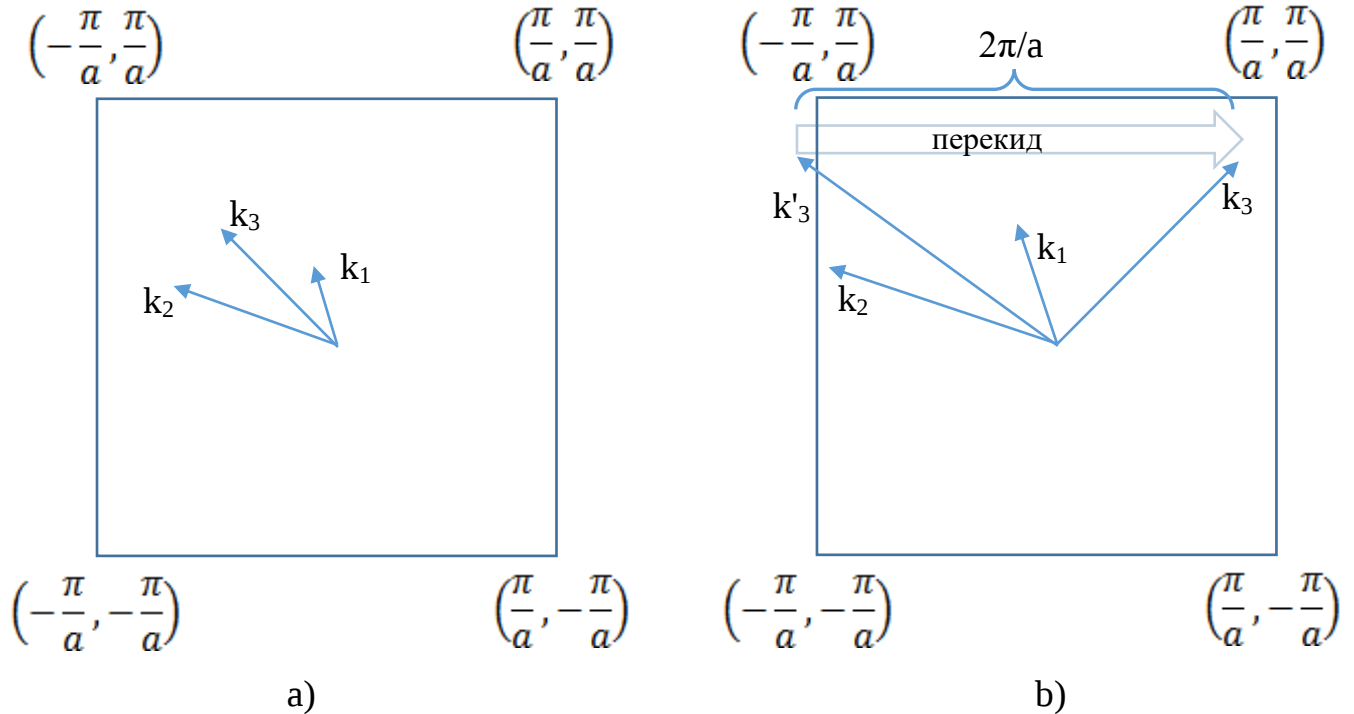


Рис. 4.1. Зображення процесу перекиду при поєднанні двох фононів. а) Сума хвильових векторів k_1 та k_2 залишається в зоні Бріллюена (квадрат). Нормальний процес. б) Результуюча сума хвильових векторів $k'_3 = k_1 + k_2$ виходить із зони Бріллюена. $k'_3 \rightarrow k'_3 - 2\pi/a = k_3$. Перекид.

У кінетичній теорії рівняння стану газу квазічастинок характеризується функцією розподілу квазічастинок $N = N(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$, яка задовольняє кінетичному рівнянню в формі рівняння Больцмана

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{g} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) N = I_{coll}, \quad (4.2)$$

де $\mathbf{g} \equiv \partial \varepsilon / \partial \mathbf{p}$ – групова швидкість квазічастинок; $\varepsilon \equiv \varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ – гамільтоніан квазічастинок, який дорівнює їх локальній енергії; I_{coll} – інтеграл зіткнень квазічастинок, який враховує різні процеси взаємодії квазічастинок.

Якщо в певний період часу система квазічастинок вийде зі стану рівноваги, то за час τ_N встановиться квазілокальна рівновага. Воно

характеризується функцією розподілу N_0 , яка звертає в нуль інтеграл зіткнень внаслідок N-процесів, і має вигляд:

$$N_0 = \left(\exp \frac{\varepsilon - (\mathbf{p}\mathbf{u})}{T_0(1+\theta)} - 1 \right)^{-1}, \quad (4.3)$$

де $\mathbf{u}$ – швидкість дрейфу в газі квазічастинок, $\Theta = (T - T_0)/T_0$ – відносна температура, T_0 – рівноважна температура.

При стані газу квазічастинок, близького до локальної статистичної рівноваги, розв'язання рівняння (4.2) в газодинамічному наближенні ми шукаємо у вигляді:

$$N = N_0 + \delta N, \quad (|\delta N| \ll N_0), \quad (4.4)$$

де N_0 – локально рівноважна функція розподілу, яка залежить від газодинамічних величин, і δN – залежить від їх градієнтів.

Якщо ввести термодинамічний потенціал F_0 як:

$$F_0 = -T \sum_k \ln(1 + N_0), \quad (4.5)$$

то знаючи його як функцію T , $\mathbf{u}$, яка задовольняє термодинамічній тотожності:

$$dF_0 = -S_0 dT - \mathbf{P} d\mathbf{u}, \quad (4.6)$$

отримаємо густину імпульсу $\mathbf{P}$, теплоємності C і ентропії S , компоненти тензора густини квазічастинок $\tilde{\rho}_{ij}$:

$$\mathbf{P} = -\left(\frac{\partial F_0}{\partial \mathbf{u}} \right)_T, \quad S_0 = -\left(\frac{\partial F_0}{\partial T} \right)_u, \quad C = T \left(\frac{\partial S_0}{\partial T} \right)_u, \quad \tilde{\rho}_{il} = \frac{\partial \bar{P}_i}{\partial u_l} = -\left(\frac{\partial^2 F_0}{\partial u_i \partial u_l} \right)_T \quad (4.7)$$

4.2. Знаходження рівнянь газодинаміки для квазічастинок в кристалічних діелектриках

Рівняння газодинаміки квазічастинок, можна побудувати із загальних принципів симетрії і з припущень покладених в основу газодинамічного опису [16,18,103-106]. Ці рівняння є рівняння балансу щільності імпульсу квазічастинок P_i і рівняння щільності енергії квазічастинки U [19, 107-109]:

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + \frac{\partial \Pi_{il}}{\partial x_l} = F_i + R_i, \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{U} = W. \quad (4.9)$$

У цих рівняннях: $\vec{F}$ – густина сили, що діє на квазічастинки з боку зовнішніх полів; $\vec{R}$ – густину сили тертя із середовищем в результаті ефектів взаємодії квазічастинок, що призводять до незбереження їх імпульсу; W враховує густину джерел енергії від сторонніх полів і внесок від взаємодії квазічастинок, що відбуваються з незбереження енергії; Π_{il} – тензор густини потоку імпульсу, а $\vec{U}$ – густина потоку енергії.

Якщо процеси взаємодії квазічастинок сорту j^* походять зі збереженням їх числа то до рівнянь (4.8), (4.9) додається рівняння балансу числа квазічастинок n_{j^*} :

$$\frac{\partial n_{j^*}}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J}^{(j^*)} = 0, \quad (4.10)$$

де $\vec{J}^{(j^*)}$ – густина потоку числа квазічастинок сорти j^* . До записаної системи рівнянь (4.8) - (4.10) допишемо ще рівняння балансу щільності ентропії.

Система рівнянь (4.8) - (4.10) не є замкнутою системою рівнянь. У феноменологічній теорії замкнутість системи досягається за рахунок використання законів термодинаміки і фізичних припущень, що дозволяють сформулювати рівняння переносу з необхідною кількістю термодинамічних змінних. В якості таких змінних зазвичай вибирають дрейфову швидкість $\vec{u}$ і температуру квазічастинок T . У системах де зберігається кількість квазічастинок до цих змінних додається або число частинок n_{j^*} , або їх хімічний потенціал μ_{j^*} .

У феноменологічній теорії щільності потоків представляються у вигляді суми щільності потоків в оборотних і необоротних процесах. При цьому оборотні потоки виражаються через обрані газодинамічні змінні за

допомогою термодинамічних тотожностей, а незворотні представляються у вигляді лінійних функцій від градієнтів цих змінних з коефіцієнтами, що задовольняють співвідношенням Онзагера [110, 111]. Ці, так звані, кінетичні коефіцієнти, або коефіцієнти переносу, в рамках феноменологічної теорії знайдені бути не можуть.

Більш послідовним є виведення рівнянь переносу на основі кінетичної теорії [19, 103 - 105]. Цей вивід дозволяє простежити перехід кінетичної теорії в газодинамічну теорію квазічастинок, визначити коефіцієнти переносу, уточнити зміст газодинамічних змінних і межі застосування рівнянь газодинаміки.

З кінетичного рівняння (4.2) безпосередньо слідують рівняння (4.8) - (4.10) в результаті множення його на $\vec{k}$, ω , 1 і підсумовування по $\vec{k}$. Відповідні величини, що входять в (4.8) - (4.10) рівні:

$$\Pi_{il} = \sum_{\vec{k}} k_i g_l N; \quad \vec{U} = \sum_{\vec{k}} \omega \vec{g} N; \quad \vec{J}^{(j^*)} = \sum_{\vec{k}} \vec{g} N^{(j^*)}; \quad (4.11)$$

$$\vec{F} = - \sum_{\vec{k}} \frac{\partial \omega}{\partial \vec{r}} N; \quad W = \sum_{\vec{k}} \omega (\dot{N})_{cm}; \quad \vec{R} = \sum_{\vec{k}} \vec{k} (\dot{N})_{cm}. \quad (4.12)$$

Відзначимо, що підсумовування по $\vec{k}$ можна замінити інтегруванням по відомим загальними правилами: $\sum_{\vec{k}} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \dots$

Згідно (1.15), ми будемо розрізняти щільності рівноважних оборотних потоків і щільності необоротних дисипативних потоків. Оборотні потоки визначаються виразами (4.11) при заміні N на N_0 , незворотні - при заміні N на δN . Для оборотних потоків залишимо колишні позначення, а для необоротних потоків імпульсу, енергії і числа квазічастинок сорти j^* введемо позначення:

$$\pi_{il} = \langle k_i g_l \psi \rangle, \quad \vec{q} = \langle \omega \vec{g} \psi \rangle, \quad \vec{i}^{(j^*)} = \langle \vec{g} \psi \rangle_{j^*}. \quad (4.13)$$

Незворотний потік ентропії $\delta \vec{S}$ пов'язаний з цими потоками співвідношенням:

$$\delta \vec{S} = \sum_{k,j} \vec{g}_z \delta N = \frac{\vec{q}_T}{T}, \quad (4.14)$$

де $q_{T_i} = q_i - \pi_{il} u_l - \sum_{j^*} \mu_{j^*} i_i^{(j^*)}$. Внесок необоротних процесів в величину $\hat{B}$

позначимо

$$\hat{b}_j = \sum_{\vec{k}} \frac{\partial \omega^{(j)}}{\partial \hat{A}_j} \cdot \delta N^{(j)}. \quad (4.15)$$

Розглянемо спочатку оборотні потоки. Оборотний потік числа квазічастинок сорти j^* дорівнює:

$$\vec{J}^{(j^*)} = \sum_{\vec{k}} \vec{g}^{(j^*)} N_0^{(j^*)} = \bar{u} n_{j^*} + \sum_{\vec{k}} \frac{\partial F_{0j^*}}{\partial \vec{k}}. \quad (4.16)$$

Другим доданком в (4.16) типу дивергенції в $\vec{k}$ -простору можна знехтувати в області низьких температур ($T \rightarrow 0$). Тензор щільності потоку імпульсу Π_{il} дорівнює

$$\Pi_{il} = \sum_{\vec{k}} k_i g_l N_0 = P_i u_l - \sum_{\vec{k}} k_i \frac{\partial}{\partial k_l} \ln(1 + N_0). \quad (4.17)$$

Інтегруючи другий доданок по частинах і нехтуючи складовими типу дивергенції по $\vec{k}$, отримуємо

$$\Pi_{il} = P_i u_l - F_0 \delta_{il} \quad (4.18)$$

Для обчислення щільності рівноважного потоку ентропії $\vec{S} = \sum_{\vec{k}} \vec{g} S_{ok}$ введемо функцію $\Phi(z)$, похідна від якої по z дорівнює S_{ok} . Цю функцію можна представити у вигляді:

$$\Phi(z) = 2 \int_0^z z N_0 dz + z \ln(1 + N_0). \quad (4.19)$$

Інтеграл, що входить в цей вираз, зводиться до функції Дебая або функції Спенса [112]. Використовуючи функцію $\Phi(z)$ отримаємо:

$$\vec{S} = \bar{u} S_0 + T \sum_{\vec{k}} \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{k}} = \bar{u} S_0. \quad (4.20)$$

Потік енергії $\vec{U}$ обчислюється аналогічним чином і дорівнює

$$\vec{U} = (U - F_0)\vec{u} = \left(\vec{P}\vec{u} + S_0T + \sum_{j^*} \mu_{j^*} n_{j^*} \right) \vec{u}. \quad (4.21)$$

Знаючи функцію розподілу квазічастинок $N^j(\vec{k}, \vec{r}, t)$ можна визначити енергію, імпульс газу квазічастинок сорту j , число квазічастинок наступними співвідношеннями:

$$\vec{P} = \sum_{\vec{k}} \vec{k} N ; U = \sum_{\vec{k}} \omega N ; n_{j^*} = \sum_{\vec{k}} N^{(j^*)} ; \quad (4.22)$$

Використовуючи отримані вирази і визначення (4.13), (4.22) запишемо рівняння переносу газу квазічастинок у вигляді [19]:

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + \frac{\partial P_i u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial F_0}{\partial x_i} + \sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial \pi_{ii}}{\partial x_i} - \sum_j \hat{b}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} + R_i ; \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \text{div}(U - F_0)\vec{u} - \sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial t} = \sum_j \hat{b}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial t} - \text{div} \vec{q} ; \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial n_{j^*}}{\partial t} + \text{div} \vec{u} n_{j^*} = - \text{div} \vec{i}^{(j^*)} ; \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \text{div} \left(\vec{u} S_0 + \frac{\vec{q}_T}{T} \right) = \delta Q - \frac{1}{T} \vec{R} \vec{u}. \quad (4.25)$$

Виробництво ентропії δQ в результаті незворотних N - процесів, що відбуваються в газі квазічастинок в результаті їх зіткнень, визначається виразом

$$\delta Q = - \sum_p \psi_p \left(\dot{N}_p \right)_N. \quad (4.26)$$

Скористаємося тотожністю для рівноважних величин, записаним у вигляді:

$$T \dot{S}_0 = \dot{U} - \vec{u} \dot{\vec{P}} - \sum_j \hat{B}_j \dot{\hat{A}}_j - \sum_{j^*} \mu_{j^*} \dot{n}_{j^*}$$

Виключивши в правій частині цієї тотожності похідні за часом за допомогою рівнянь переносу (4.22) – (4.24) і порівнявши з (4.25), отримаємо рівняння, що зв'язує виробництво ентропії δQ з незворотними потоками:

$$\delta Q = -\bar{q}_T \frac{\nabla T}{T^2} - \pi_{il} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} \cdot \frac{1}{T} - \sum_{j^*} \vec{i}^{(j^*)} \nabla \mu_{j^*} \cdot \frac{1}{T} + \sum_j \hat{b}_j \left(\dot{\hat{A}}_j + (\vec{u} \nabla) \hat{A}_j \right) \frac{1}{T}. \quad (4.27)$$

Це рівняння за відсутності зовнішніх полів $\hat{A}_j \equiv 0$ збігається з відомим рівнянням для виробництва ентропії в рідкій суміші [109].

У разі малих градієнтів температури, хімічного потенціалу і дрейфової швидкості за відсутності зовнішніх полів незворотні потоки $\vec{i}^{(j^*)}$, $\bar{q}$, і π_{il} є лінійними функціями цих градієнтів. Скориставшись теорією Онзагера [110, 111], отримаємо:

$$i_l^{(j^*)} = -\tilde{\alpha}_{lk}^{(j^*)} \nabla_k \mu_{j^*} - \tilde{\beta}_{lk}^{(j^*)} \nabla_k T; \quad (4.28)$$

$$q_{Ti} = -T \sum_{j^*} \tilde{\beta}_{il}^{(j^*)} \nabla_l \mu_{j^*} - \tilde{\kappa}_{il} \nabla_l T; \quad (4.29)$$

$$\pi_{il} = -\tilde{\eta}_{ilmn} \frac{\partial u_m}{\partial x_n}, \quad (4.30)$$

де $\tilde{\alpha}_{lk}^{(j^*)}$, $\tilde{\beta}_{il}^{(j^*)}$, $\tilde{\eta}_{ilmn}$ и $\tilde{\kappa}_{il}$ – кінетичні коефіцієнти. Обчислення їх проводиться в пункті 4.3. Для ізотропного середовища:

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_{il} &= \tilde{\kappa} \delta_{il}; \quad \tilde{\beta}_{il}^{(j^*)} = \tilde{\beta}^{(j^*)} \delta_{il}; \quad \tilde{\alpha}_{lk}^{(j^*)} = \tilde{\alpha}^{(j^*)} \delta_{lk}; \\ \tilde{\eta}_{ilmn} &= \tilde{\eta} \left(\delta_{im} \delta_{ln} + \delta_{in} \delta_{lm} - \frac{2}{3} \delta_{il} \delta_{mn} \right) + \tilde{\zeta} \delta_{il} \delta_{mn}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

де $\tilde{\eta}$, $\tilde{\zeta}$ – коефіцієнти першої і другої в'язкості газу квазічастинок.

При малих дрейфовій швидкостях $\vec{u}$ з теорії Онзагера випливає, що густину сили зовнішнього тертя $\vec{R}$ буде лінійною функцією компонент $\vec{u}$:

$$R_i = -r_{il} u_l, \quad (4.32)$$

де r_{il} – симетричний тензор кінетичних коефіцієнтів зовнішнього тертя. При обчисленні щільності сили тертя $\vec{R}$, обумовленої U -процесами в інтегралі

зіткнень в доданках з $\vec{\tau} \neq 0$ функції N_p можна замінити їх локально-рівноважними значеннями N_{0p} , а вирази виду $(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3)$ і $(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4)$ покласти рівними $2\pi\vec{\tau}$ внаслідок законів збереження квазіімпульса. В результаті отримаємо:

$$\vec{R} = -\sum_{\vec{\tau}} 2\pi\vec{\tau} (1 - \exp(-2\pi\vec{\tau}\vec{u})) \left(\sum_{1,2,3} W_{\vec{\tau}}^{(3)} + \sum_{1,2,3,4} W_{\vec{\tau}}^{(4)} \right), \quad (4.33)$$

Якщо розкласти експоненту в (4.33) в ряд за ступенями $\vec{\tau}\vec{u}$, то в лінійному наближенні по $\vec{u}$, як і впливає з теорії Онзагера, $\vec{R}$ визначається виразом (4.32), де

$$r_{il} = \frac{(2\pi)^2}{T} \sum_{\vec{\tau}} \tau_i \tau_l \left(\sum_{1,2,3} W_{\vec{\tau}}^{(3)}(1,2,3) + \sum_{1,2,3,4} W_{\vec{\tau}}^{(4)}(1,2,3,4) \right), \quad (4.34)$$

Запишемо в лінійному наближенні по $\vec{u}$ рівняння переносу, вибравши в якості незалежних змінних $\vec{u}$, T , μ_{j^*} . З (4.22) - (4.25) знаходимо:

$$\tilde{\rho}_{il} \dot{u}_l + ST \nabla_i \theta + \sum_{j^*} n_{j^*} \nabla_i \mu_{j^*} = -\frac{\partial \pi_{il}}{\partial x_l} - \sum_j \hat{b}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} - r_{il} u_l; \quad (4.35)$$

$$C^* \dot{\theta} + S^* \operatorname{div} \vec{u} + \sum_j \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j = \frac{1}{T} \left(-\operatorname{div} \vec{q} + \sum_j \hat{b}_j \dot{\hat{A}}_j \right); \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned} \beta_{j^*} \dot{\mu}_{j^*} + T \left(n_{j^*} - \frac{S^*}{C^*} \alpha_{j^*} \right) \operatorname{div} \vec{u} - T \left(\frac{\alpha_{j^*}}{C^*} \sum_j \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j - \sum_j \frac{\partial n_{j^*}}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j \right) = \\ = \frac{\alpha_{j^*}}{C^*} \operatorname{div} \vec{q} - T \operatorname{div} \vec{i}^{(j^*)} - \frac{\alpha_{j^*}}{C^*} \sum_j \hat{b}_j \dot{\hat{A}}_j, \end{aligned} \quad (4.37)$$

де величини S^* , $\vec{q}$ – модифіковані значення ентропії і теплового потоку, що враховують процеси взаємодії квазічастинок, що відбуваються зі збереженням їх числа

$$S^* = S - \sum_{j^*} \frac{n_{j^*} \alpha_{j^*}}{\beta_{j^*}}; \quad \vec{q} = \vec{q}_T - \sum_{j^*} \frac{\alpha_{j^*}}{\beta_{j^*}} T \cdot \vec{i}^{(j^*)}. \quad (4.38)$$

Коли число квазічастинок не зберігається, система рівнянь (4.35) - (4.37) має вигляд

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{il} \dot{u}_l + ST \nabla_i \theta + r_{il} u_l - \tilde{\eta}_{ilmn} \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_l \partial x_n} + \sum_j \hat{b}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} &= 0 ; \\ C \dot{\theta} + S \operatorname{div} \vec{u} - \tilde{\kappa}_{il} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x_i \partial x_l} + \sum_j \dot{\hat{A}}_j \frac{\partial S}{\partial \hat{A}_j} - \frac{1}{T} \sum_j \hat{b}_j \dot{\hat{A}}_j &= 0 . \end{aligned} \quad (4.39)$$

Для ізотропного кристалу, коли $\delta \hat{A}_j = 0$, система цих рівнянь аналогічна рівнянням Нав'є-Стокса [106]:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} \dot{\vec{u}} + ST \nabla \theta &= -r \vec{u} + \tilde{\eta} \Delta \vec{u} + \left(\tilde{\zeta} + \frac{\tilde{\eta}}{3} \right) \cdot \nabla \operatorname{div} \vec{u} ; \\ C \dot{\theta} + S \operatorname{div} \vec{u} &= \tilde{\kappa} \Delta \theta . \end{aligned} \quad (4.40)$$

Коефіцієнту r можна дати наступні фізичні інтерпретації. В однорідному випадку перше рівняння в (4.39) буде мати вигляд: $\tilde{\rho} \dot{\vec{u}} = -r \vec{u}$. Рішення цього рівняння $\vec{u} = \vec{u}_0 e^{-\frac{r}{\tilde{\rho}} t}$ дає можливість інтерпретувати $r/\tilde{\rho}$ як час релаксації дрейфової швидкості до нуля. У стаціонарному випадку із заданим градієнтом перше рівняння (4.39) набуде вигляду: $u_i = r_{il}^{-1} ST \nabla_l \theta$. Потік енергії, пов'язаний із заданим градієнтом температури, дорівнює $q_i = TS u_i = -T^2 S^2 r_{il}^{-1} \cdot \nabla_l \theta$, звідки отримуємо такий вираз для тензора статичної теплопровідності:

$$\kappa_{il} = TS^2 r_{il}^{-1} . \quad (4.41)$$

При виведенні рівнянь переносу накладалися певні обмеження на величини $\vec{u}$, T і їх похідні за часом і по координаті. При газодинамічному описі квазічастинок дрейфова швидкість $\vec{u}$ повинна бути менше деякої характерної швидкості, аналогічної швидкості звуку в звичайній звуковій газодинаміці. У нашому випадку такий характерною швидкістю є швидкість вторинних хвиль W_{II} , обчислення якої проводиться в наступному п. Температура повинна бути менше характерної температури газу квазічастинок Θ , що дорівнює температурі Дебая Θ_D для фононів.

Умови для градієнтів u , μ_{j*} , T зручно уявити, скориставшись поняттям довжини вільного пробігу, розглядаючи теплопровідність і в'язкість газу квазічастинок як явища дифузії енергії і імпульсу газу квазічастинки з характерною швидкістю порядку швидкості вторинних хвиль W_{II} . Якщо число квазічастинок не зберігається, то в ізотропному кристалі ці довжини визначаються в такий спосіб:

$$\tilde{\kappa} = CW_{II}l_{\tilde{\kappa}}; \tilde{\eta} = \tilde{\rho}W_{II} \cdot l_{\tilde{\eta}}; \tilde{\zeta} = \tilde{\rho}W_{II}l_{\tilde{\zeta}}; r = \frac{TS^2}{CW_{II}l_{\kappa}}. \quad (4.42)$$

На відміну від звичайних газів, ці довжини $l_{\tilde{\kappa}}, l_{\tilde{\eta}}, l_{\tilde{\zeta}}, l_{\kappa}$ можуть відрізнятися на порядки величини. В цьому відношенні газ квазічастинок подібні рідин.

Використовуючи наведені вище визначення, умови застосовності рівнянь переносу газу квазічастинок, щодо градієнтів можна записати у вигляді:

$$l_{\tilde{\kappa}} \cdot |\nabla \theta| \ll 1; l_{\tilde{\eta}} \cdot \frac{|\nabla u|}{W_{II}} \ll 1; l_{\tilde{\zeta}} \cdot \frac{|\nabla u|}{W_{II}} \ll 1. \quad (4.43)$$

Ці умови випливають з умови $|\delta N| \ll N_0$. З нього ж слідують умови характерних часів зміни газодинамічних змінних

$$\Delta t \gg \max(\tau_{\tilde{\kappa}}, \tau_{\tilde{\eta}}, \tau_{\tilde{\zeta}}), \quad (4.44)$$

$$\tau_{\tilde{\kappa}} = \frac{l_{\tilde{\kappa}}}{W_{II}}; \tau_{\tilde{\eta}} = \frac{l_{\tilde{\eta}}}{W_{II}}; \tau_{\tilde{\zeta}} = \frac{l_{\tilde{\zeta}}}{W_{II}}. \quad (4.45)$$

4.3. Оцінка коефіцієнтів в'язкості та теплопровідності квазічастинок.

Не вирішуючи кінетичні рівняння, можна строго встановити за допомогою нерівності Коші-Буняковського нижню межу для швидкості зміни ентропії δQ [113, 114], що є природним узагальненням Н-теореми Больцмана при наявності зовнішніх джерел модуляції енергії квазічастинок. Це дозволяє, використовуючи нижню межу отримати хорошу оцінку поглинається потужності енергії газом квазічастинок від зовнішніх джерел модуляції з урахуванням всіх можливих дисипативних процесів, оцінити

загасання зовнішнього поля, а також отримати нижню межу величин кінетичних коефіцієнтів входять в рівняння газодинаміки квазічастинок. Загальний висновок нижньої межі для δQ в разі будь-якого числа і сорту взаємодіючих квазічастинок міститься в роботі [114]. Тут ми наведемо, для простоти, висновок цього виразу в випадки взаємодії трьох квазічастинок. Запишемо лінеаризоване щодо ψ кінетичне рівняння в цьому випадки у вигляді:

$$\bar{N}_p (1 \pm \bar{N}_p) \delta_p = (\dot{N}_p^{(3)})_N \quad (4.46)$$

У виразі (4.46) ми знехтували внеском ψ в кінематичну частину лінеаризованого кінетичного рівняння в наслідок слабкої неоднорідності і повільного зміни в часі величин, а також внеском від U - процесів в інтегралі зіткнень, облік яких привів би до перевищення точності.

Якщо ввести позначення $A_p = \sqrt{W_0(1,2;3)}(\delta_{p_1} + \delta_{p_2} - \delta_{p_3})$; $B_p = \sqrt{W_0(1,2;3)}(\psi_1 + \psi_2 - \psi_3)(\delta_{p_1} + \delta_{p_2} - \delta_{p_3})$, то можна записати:

$$\begin{aligned} \sum_{1,2,3} A_p^2 &\equiv \bar{N}_p (1 + \bar{N}_p) \nu_p^{(3)}; \quad \sum_{1,2,3} B_p^2 = \delta Q_p; \\ \sum_{1,2,3} A_p B_p &\equiv (\dot{N}_p^{(3)})_N = \bar{N}_p (1 + \bar{N}_p) \delta_p \end{aligned} \quad (4.47)$$

Для цих сум застосуємо нерівність Коші-Буняковського

$$\left(\sum_{1,2,3} A_p B_p \right)^2 \leq \sum_{1,2,3} A_p^2 \cdot \sum_{1,2,3} B_p^2 \quad (4.48)$$

Звідки випливає

$$\delta Q_p = \sum_{1,2,3} W_0(1,2;3) (\psi_1 + \psi_2 - \psi_3)^2 (\delta_{p_1} + \delta_{p_2} - \delta_{p_3}) \geq \frac{\bar{N}_p (1 + \bar{N}_p) \delta_p^2}{\nu_p^{(3)}}.$$

Помічаючи, що $\delta Q = \frac{1}{3} \sum_p \delta Q_p$, знаходимо

$$\delta Q \geq \frac{1}{3} \left\langle \frac{|\delta_p|^2}{\nu^{(3)}} \right\rangle. \quad (4.49)$$

Скористаємося нерівністю (4.49) для знаходження нижньої межі значень кінетичних коефіцієнтів входять в рівняння газодинаміки квазічастинок (4.35) - (4.37).

Підставляючи в формулу (1.65) для виробництва ентропії δQ значення потоків (4.28) - (4.30) отримаємо за відсутності сторонніх полів такий вираз

$$\begin{aligned} \delta Q = \sum_{j^*} 2\tilde{\beta}_{il}^{(j^*)} \cdot \nabla_l \mu_{j^*} \cdot \nabla_i \theta + \tilde{\kappa}_{il} \nabla_i \theta \cdot \nabla_l \theta + \frac{\tilde{\eta}_{ilmn}}{T} \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_l} \cdot \frac{\partial u_m}{\partial x_n} + \\ + \frac{1}{T} \sum_{j^*} \tilde{\alpha}_{lk}^{(j^*)} \cdot \nabla_k \mu_{j^*} \cdot \nabla_l \mu_{j^*} . \end{aligned} \quad (4.50)$$

Виключимо похідні за часом від θ , $\vec{u}$ і μ_{j^*} в δ_p , скориставшись наступними виразами, що отримуються з рівнянь (4.35) - (4.37) для ідеальної газодинаміки квазічастинок:

$$\dot{u}_i = -ST\tilde{\rho}_{il}^{-1} \nabla_l \theta - \sum_{j^*} n_{j^*} \tilde{\rho}_{il}^{-1} \cdot \nabla_l \mu_{j^*} ; \quad (4.51)$$

$$\dot{\theta} = -\frac{S^*}{C^*} \operatorname{div} \vec{u} - \frac{1}{C^*} \sum_j \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j ; \quad (4.52)$$

$$\dot{\mu}_{j^*} = -\frac{T}{\beta_{j^*}} \left(n_{j^*} - \frac{S^*}{C^*} \alpha_{j^*} \right) \operatorname{div} \vec{u} + \frac{T}{\beta_{j^*}} \left(\frac{\alpha_{j^*}}{C^*} \sum_j \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j - \sum_j \frac{\partial n_{j^*}}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j \right) . \quad (4.53)$$

Тоді вираз для δ_p запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} \delta_p = \frac{\omega_{0p}}{T_0} \left\{ \frac{\partial \hat{a}_p^{(j)}}{\partial t} - \vec{g}_p \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \left(\theta + \frac{\vec{k}_p \vec{u}}{\omega_{0p}} + \frac{\mu_{j^*} \delta_{jpj^*}}{\omega_{0p}} \right) + \frac{S^*}{C^*} \operatorname{div} \vec{u} + \sum_j \frac{1}{C^*} \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j + \right. \\ + \frac{k_{pi}}{\omega_{0p}} ST\tilde{\rho}_{il}^{-1} \nabla_l \theta + \frac{k_{pi}}{\omega_{0p}} \sum_{j^*} n_{j^*} \tilde{\rho}_{il}^{-1} \nabla_l \mu_{j^*} + \frac{\delta_{jpj^*}}{\omega_{0p}} \cdot \frac{T}{\beta_{j^*}} \left(n_{j^*} - \frac{S^*}{C^*} \alpha_{j^*} \right) \operatorname{div} \vec{u} - \\ \left. - \frac{\delta_{jpj^*}}{\omega_{0p}} \frac{T}{\beta_{j^*}} \cdot \frac{\alpha_{j^*}}{C^*} \sum_j \frac{\partial S^*}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j + \frac{\delta_{jpj^*}}{\omega_{0p}} \cdot \frac{T}{\beta_{j^*}} \sum_j \frac{\partial n_{j^*}}{\partial \hat{A}_j} \dot{\hat{A}}_j \right\} . \end{aligned} \quad (4.54)$$

За відсутності зовнішніх полів $\delta \hat{A}_j = 0$ останній вираз має вигляд:

$$\begin{aligned} \delta_p = \frac{\omega_{0p}}{T_0} \left\{ \left(\frac{k_{pi}}{\omega_{0p}} ST \tilde{\rho}_{il}^{-1} - g_{pl} \right) \cdot \nabla_l \theta + \left[\left(\frac{S^*}{C^*} + \frac{T \delta_{jpj^*}}{\omega_{0p} \beta_{j^*}} \left(n_{j^*} - \frac{S^*}{C^*} \alpha_{j^*} \right) \right) \delta_{il} - \right. \right. \\ \left. \left. - g_{pl} \frac{k_{pi}}{\omega_{0p}} \right] \frac{\partial u_i}{\partial x_l} + \left[\frac{k_{pi}}{\omega_{0p}} \sum_{j^*} n_{j^*} \tilde{\rho}_{il}^{-1} - g_{pl} \frac{1}{\omega_{0p}} \right] \delta_{jpj^*} \cdot \nabla_l \mu_{j^*} \right\}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

Підставляючи (4.55) в (4.49) і порівнюючи з (4.50), отримаємо наступні оцінки нижніх меж кінетичних коефіцієнтів:

$$\tilde{\kappa}_{il} \geq \left\langle \frac{x^2}{\sum_n n \nu^{(n)}} \left(\frac{ST}{\omega_0} k_t \tilde{\rho}_{tl}^{-1} - g_l \right) \left(\frac{ST}{\omega_0} k_p \tilde{\rho}_{pi}^{-1} - g_i \right) \right\rangle; \quad (4.56)$$

$$\tilde{\eta}_{ilmn} \geq \left\langle \frac{x^2}{\sum_n n \nu^{(n)}} \left(D \delta_{il} - \frac{1}{\omega_0} g_l k_i \right) \left(D \delta_{nm} - \frac{1}{\omega_0} g_m k_n \right) \right\rangle; \quad (4.57)$$

Або в разі ізотропного кристалу, враховуючи співвідношення (4.31), оцінки (4.56) і (4.57) можна записати у вигляді [115]:

$$\tilde{\kappa} \geq \frac{1}{3} \left\langle \frac{x^2}{\sum_n n \nu^{(n)}} \left(\frac{ST}{\omega_0} \tilde{k} \tilde{\rho}^{-1} - \tilde{g} \right)^2 \right\rangle. \quad (4.58)$$

$$\tilde{\eta} \geq \left\langle \frac{x^2}{\sum_n n \nu^{(n)}} (\tilde{g} \tilde{k})^2 \right\rangle. \quad (4.59)$$

Дійсно, використовуючи узагальнену Н-теорему Больцмана (4.49), можна отримати нижні оцінки коефіцієнтів $\tilde{\kappa}$ і $\tilde{\eta}$ (4.58), (4.59) в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \tilde{\kappa}_{\min} &= \frac{1}{9\pi^2} \left(\frac{1 - \beta^2}{2 + \beta^5} \right)^2 \frac{T^3}{V_l} \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \left[\frac{2}{\nu_l(x)} + \frac{\beta^6}{\nu_t(x)} \right] dx. \\ \tilde{\eta}_{\min} &= \frac{1}{90\pi^2} \frac{T^4}{V_l^3} \int_0^\infty \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} \left[\frac{1}{\nu_l(x)} + \frac{2}{\beta^3 \nu_t(x)} \right] dx. \end{aligned} \quad (4.60)$$

де $\nu_{l,t}(x)$ – частоти зіткнень поздовжніх і поперечних фононів.

4.4. Розрахунок області існування ХДЗ в алмазі з урахуванням границі і концентрації домішок ізотопів

Рішення рівнянь (4.40) для всіх змінних будемо шукати у вигляді $\exp[i(\Omega t - \tilde{\mathbf{k}}\mathbf{r})]$ з частотою Ω і хвильовим вектором $\tilde{\mathbf{k}}$. З умови спільності системи рівнянь ми отримуємо дисперсійне рівняння для вторинних хвиль:

$$\Omega(\Omega^2 - W_{II}^2 \tilde{k}^2) - 2iW_{II}^2 \tilde{k}^2 \Gamma_{II} = 0. \quad (4.61)$$

З дисперсійного рівняння (4.61) випливає, що W_{II} є фазовою швидкістю вторинних хвиль і величина Γ_{II} коефіцієнт загасання вторинних хвиль. Вирази для W_{II} і Γ_{II} мають простий вигляд для вторинних хвиль в ізотропному газі квазічастинок:

$$W_{II} = (TS^2/C\tilde{\rho})^{1/2}, \quad \Gamma_{II} = \frac{r}{2\tilde{\rho}} + \left[\frac{1}{2\tilde{\rho}} \left(\frac{4}{3}\tilde{\eta} + \tilde{\zeta} \right) + \frac{1}{2C}\tilde{\kappa} \right] \tilde{k}^2. \quad (4.62)$$

Для фононного газу в низькотемпературній області $\Theta_D/T \gg 1$ в моделі зведеного ізотропного кристала отримані наступні вирази $C = 3S = \frac{2\pi^2}{15} \frac{k_b^4 T^3}{\hbar^3 V_t^3} (2 + \beta^3)$, $\tilde{\rho} = \frac{2\pi^2}{45} \frac{k_b^4 T^4}{\hbar^3 V_t^5} (2 + \beta^5)$, $\Theta_D = 2\pi\hbar V_s/k_B a$. Швидкість другого звуку має вигляд:

$$W_{II} = \frac{V_t^2}{3} \left(\frac{2 + \beta^3}{2 + \beta^5} \right). \quad (4.63)$$

Якщо ввести дифузійні часи наступними співвідношеннями ($\tilde{\kappa}, \tilde{\eta}, \tilde{\zeta}$ з (4.60)):

$$\tau_{\tilde{\eta}} = \frac{\tilde{\eta}}{\tilde{\rho}W_{II}^2}; \quad \tau_{\tilde{\zeta}} = \frac{\tilde{\zeta}}{\tilde{\rho}W_{II}^2}; \quad \tau_{\tilde{\kappa}} = \frac{\tilde{\kappa}}{CW_{II}^2}; \quad \tau_R = \frac{\tilde{\rho}}{r}. \quad (4.64)$$

то величина Γ_{II} може бути записана у вигляді:

$$\Gamma_{II} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\tau_R} + \left(\frac{4}{3}\tau_{\tilde{\eta}} + \tau_{\tilde{\zeta}} \right) \Omega^2 + \tau_{\tilde{\kappa}} \Omega^2 \right] \quad (4.65)$$

Умова існування слабо згасаючих ХДЗ ($\Gamma_{II} \ll \Omega$) приводить до наступної умови, що накладаються на частоту Ω , відомому як "вікно" існування ХДЗ:

$$\min\{\nu_{\tilde{\eta}}, \nu_{\tilde{\zeta}}, \nu_{\tilde{\kappa}}\} \gg \Omega \gg \nu_R. \quad (4.66)$$

де частоти зіткнень ν_i пов'язані з дифузійним часом τ_i співвідношеннями $\nu_i = 1/\tau_i$.

Розрахунки кінетичних коефіцієнтів фононої газодинаміки в моделі зведеного ізотропного кристала щодо модулів пружності, проведені в роботі [19], показують, що основну роль грає фононна в'язкість. Число, подібне числу Прандтля в теорії газів $Pr = \frac{C\tilde{\eta}}{\tilde{\rho}\tilde{\kappa}}$, в газі фононів для більшості кристалів дорівнює 10^2 з досить великою точністю.

Облік розсіювання фононів на кордонах здійснюється використовуючи відношення між довжиною вільного пробігу за рахунок нормальних процесів $l_N = \tau_N V_S$ і розміром зразка D . Якщо виконується відношення $l_N \gg D$, то ефективна довжина вільного пробігу фононів збігається з розмірами зразка, і частота розсіювання на кордоні визначається як: $\nu_B = V_S/D$. ХДЗ існують в діелектриках при газодинамічному режимі опису фононів, який реалізується якщо виконується нерівність $l_N \ll D$. Фонон в об'ємі зразка відчуває безліч нормальних зіткнень до досягнення границі. В результаті шлях, який проходить фонон до зіткнення з границею, істотно зростає. Використовуючи добре відомі формули броунівського руху легко бачити, що траєкторії між двома зіткненнями з границею будуть порядку D^2/l_N [116]. Це означає, що ефективна частота зіткнення фононів з границею буде:

$$\nu_{Beff} = \frac{V_S^2}{D^2 \nu_N} = \frac{\nu_B^2}{\nu_N}. \quad (4.67)$$

Для подальших розрахунків будемо вважати, що умова існування ХДЗ виконуються, якщо частота другого звуку задовольняє нерівності:

$$\Omega_{II} \geq 10\Gamma_{II}. \quad (4.68)$$

З цього співвідношення можна отримати нижню і верхню межі частоти ХДЗ:

$$0.1\nu_N - \sqrt{10^{-2}\nu_N^2 - \nu_N\nu_R} \leq \Omega_{II} \leq 0.1\nu_N + \sqrt{10^{-2}\nu_N^2 - \nu_N\nu_R}. \quad (4.69)$$

ХДЗ є власними модами, тому якщо кристал має характерний розмір D , то значення хвильового вектора ХДЗ визначається співвідношенням

$$\tilde{k} = \frac{2\pi}{D}. \quad (4.70)$$

Використовую ці співвідношення і $\Omega_{II} = W_{II} \tilde{k}$, можна розв'язати нерівність (4.69) і отримати таку умову:

$$C_{iso} \leq \left[0.4 \frac{\pi W_{II}}{D} - \nu_U - \frac{V_S^2 + 4\pi^2 W_{II}^2}{D^2 \nu_N} \right] \frac{4! \zeta(4)}{8! \zeta(8)} \frac{4\pi \hbar^4 V_S^3}{k_B^4 a^3 T^4} \left(\frac{M}{\Delta M} \right)^2, \quad (4.71)$$

Воно дозволяє побудувати графік залежності концентрації C_{iso} від розмірів і температури, використовуючи який можна визначити вікно існування ХДЗ.

Далі наведемо формули для частот зіткнень в моделі зведеного ізотропного кристала, враховуючи, що законами збереження енергії та квазіімпульса дозволені такі процеси перекиду $t + t \leftrightarrow l + b_g$ і $l + t \leftrightarrow l + b_g$.

$$\nu_N = \nu_{\tilde{\eta}} = \frac{2\pi^2}{45} (2 + \beta^3) \frac{k_B^5}{\hbar^4} \frac{T^5}{\alpha_{\tilde{\eta}} \rho V_l^2 V_t^3}, \quad \nu_U = A_1 T^{-3} e^{-\frac{\Theta_1}{T}} + A_2 T^{-1} e^{-\frac{\Theta_2}{T}}, \quad (4.72)$$

$$\nu_{iso} = 61,76 \cdot a^3 \left(\frac{k_B}{\hbar} \right)^4 (2 + \beta^3) T^4 C_d (\Delta M / M)^2, \quad \nu_B = \frac{V_S}{D}$$

$$\begin{aligned} \text{де } A_1 &= \frac{3\pi^3 \beta^2 (15 - 10\beta^2 + 3\beta^4)}{4(1 + \beta)^6 (2 + \beta^5)} (1 + \bar{b} + \bar{g})^2 \frac{\hbar^4 V_l^3}{k_B^3 \rho a^8}; & \Theta_1 &= \frac{2\pi \beta V_l \hbar}{k_B (1 + \beta) a} \\ A_2 &= \frac{45\pi (1 - \beta)(7 - 5\beta)}{64(1 + \beta)(2 + \beta^5) \beta^2} (1 + \beta^2 + 2\bar{b} + 4\bar{g})^2 \frac{\hbar^2 V_l}{k_B \rho a^6}; & \Theta_2 &= \frac{\pi (1 + \beta) V_l \hbar}{2k_B a}, \end{aligned}$$

$C_d = \frac{N_i}{N}$ – концентрація ізоотопів, ΔM – різниця між атомними масами ізоотопів і основної речовини, M – маса основних атомів, D – розміри зразка, k_B – постійна Больцмана, $\alpha_{\tilde{\eta}} \sim 10^{-2}$.

Для проведення чисельних оцінок і обчислення умови існування слабо-загасаючих ХДЗ в алмазі були використані наступні дані, розраховані в моделі зведеного ізотропного кристала: $W_{II} = 0,74 \cdot 10^6$ см/с, $\Theta_1 = 984$ К, $\Theta_2 = 1022$ К, $A_1 = 2,345 \cdot 10^{17}$ К³/с, $A_2 = 8,6 \cdot 10^{12}$ К/с, $\Theta_D^{meop} = 2239$ К.

Вирази для частот зіткнень нормальних, процесів перекидання, з ізотопами, зі стінками в моделі зведеного ізотропного кристала мають вигляд відповідно:

$$\nu_N = 0,2 T^5 c^{-1}, \quad \nu_{iso} = 7,135 \cdot 10^3 T^4 C_d c^{-1}$$

$$\nu_U = 2,345 \cdot 10^{17} T^{-3} \exp\left(-\frac{\Theta_1}{T}\right) + 8,6 \cdot 10^{12} T^{-1} \exp\left(-\frac{\Theta_2}{T}\right) \quad (4.73)$$

$$\nu_B = 1,5 \cdot 10^6 c^{-1} \quad (4.74)$$

Підставляючи вирази (4.73), (4.74) в нерівність (4.66) ми отримуємо "вікно" існування ХДЗ в монокристалі алмазу в моделі зведеного ізотропного кристала. На рисунку 4.2 наведено графіки залежності частот зіткнень $\nu(T)$ від температури для різних концентрацій ізотопу ^{13}C :

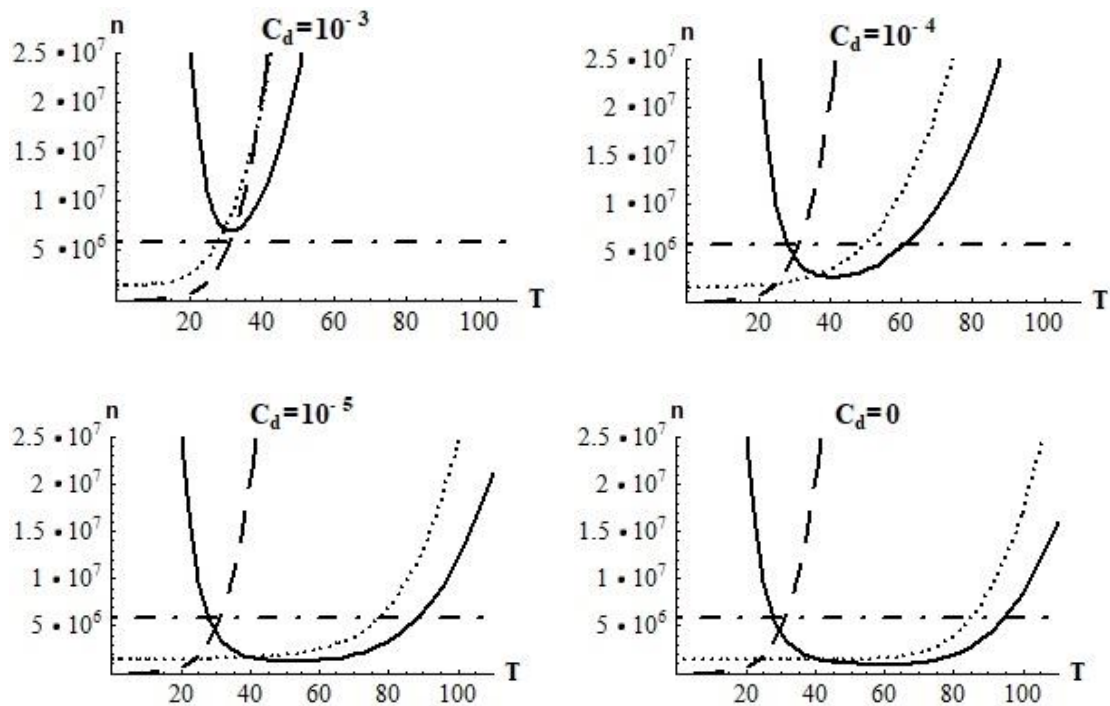


Рис.4.2. Область існування хвиль другого звуку в моделі зведеного ізотропного кристала для різних концентрацій ізотопів: а) $C_d = 10^{-3}$ б) $C_d = 10^{-4}$, в) $C_d = 10^{-5}$, г) $C_d = 0$. Суцільна лінія – Γ_{II} , пунктирна лінія – ν_N , точкова лінія – ν_R , штрих-пунктирна лінія – частота другого звуку Ω_{II}

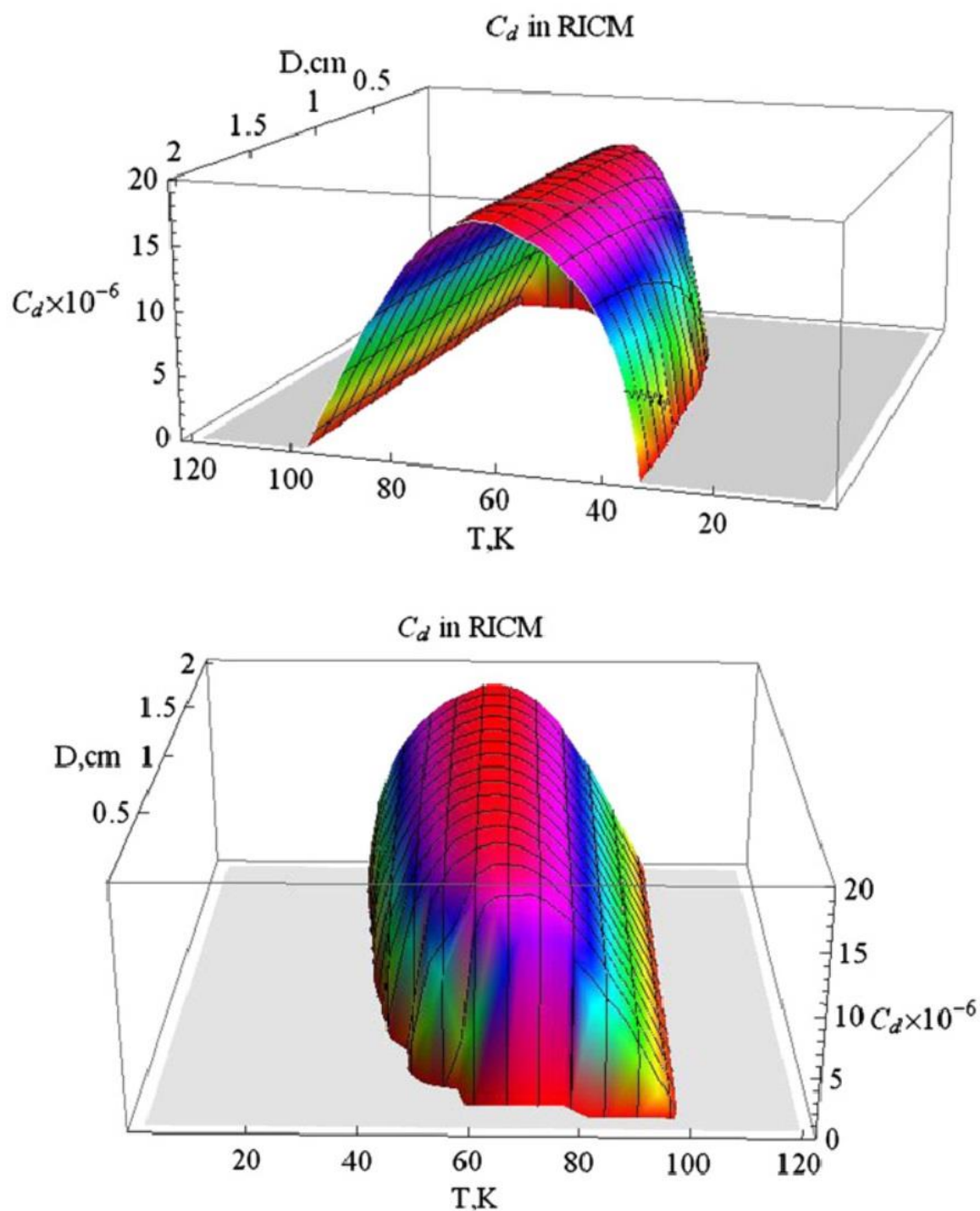


Рис.4.3. Область існування хвиль другого звуку в моделі зведеного ізотропного кристала. для всіх можливих співвідношень концентрацій ізоотопів і розміру зразка.

На рис. 4.3 наведена область існування хвиль другого звуку для всіх можливих співвідношень концентрацій ізоотопів вуглецю і розміру зразка в

моделі зведеного ізотропного кристала. Хвилі існують при значеннях параметрів під кольоровою поверхнею.

З аналізу наведених графіків видно, що "вікно" існування ХДЗ знаходиться в області температур $30 < T < 80$ К, для концентрації ізоотпу ^{13}C $C_d = 10^{-5}$. Форма наведених кривих відображає конкуренцію нормальних і резистивних процесів взаємодії фононів. У високотемпературній області (вище 50К) переважають процеси перекиду, в області температур менше 50К переважають нормальні процеси і процеси розсіювання фононів на домішках і межах зразка.

4.4.1. Розрахунок в моделі Калавея

У діапазоні низьких температур в моделі Калавея [100-102,117,118] для опису експериментальних даних по теплопровідності алмаза використовуються наступні частоти зіткнень фононів, викликані нормальними і процесами перекиду, а також процесами розсіювання на ізоотопах:

$$\begin{aligned} \nu_{NI} &= B_{NI} \omega^2 T^3, & \nu_{Nt} &= B_{Nt} \omega T^4, \\ \nu_U &= B_0 \omega^2 T e^{-C_0/T} & \nu_d &= C_d \frac{V_s a^3}{4\pi} \left(\frac{\Delta M}{M} \right)^2 k^4. \end{aligned} \quad (4.75)$$

де $B_{NI} = 3.5 \cdot 10^{-26} \text{ K}^{-3} \text{ c}$, $B_{Nt} = 3 \cdot 10^{-14} \text{ K}^{-4}$, $B_0 = 2.1 \cdot 10^{-20} \text{ K}^{-1} \text{ c}$, $C_0 = 670 \text{ K}$ — константи, обчислені з експериментів [100].

Проводячи процедури усереднення з використанням правила для нормальних процесів, процесів розсіювання на ізотопи і границі

$$\langle f(x) \rangle = \int_0^\infty \frac{x^4 \exp[x]}{(\exp[x]-1)^2} f(x) dx \bigg/ \int_0^\infty \frac{x^4 \exp[x]}{(\exp[x]-1)^2} dx. \quad (4.76)$$

ми отримаємо такі вирази для усереднених частот фононних зіткнень для нормальних процесів:

$$\nu_{NI} = \langle \nu_{NI} \rangle + \langle \nu_{Nt} \rangle = 4 \cdot 10^{-2} T^5 \text{ c}^{-1} \quad (4.77)$$

Частоти процесів розсіювання на ізотопи і кордоні мають вигляд (4.74). Для усереднення частоти зіткнень фононів за рахунок процесів перекидання

треба взяти кінцеві межі інтегрування X_1, X_2 для інтеграла в чисельнику у формулі (4.76). Це пов'язано з тим, що фононна частота, що входить в $1/\tau_U$ має порядок порівняний з порядком дебаєвської, і величина її зміни може бути визначена з закону збереження енергії і імпульсу. Для процесу $l + t \leftrightarrow l + b_g$ межі X_1, X_2 дорівнюють

$$X_1 = \frac{\pi \hbar (1 - \beta) V_l}{2 a k_B T}, \quad X_2 = \frac{\pi \hbar V_l}{a k_B T}. \quad (4.78)$$

Для самої частоти процесів перекидання тепер необхідно використовувати

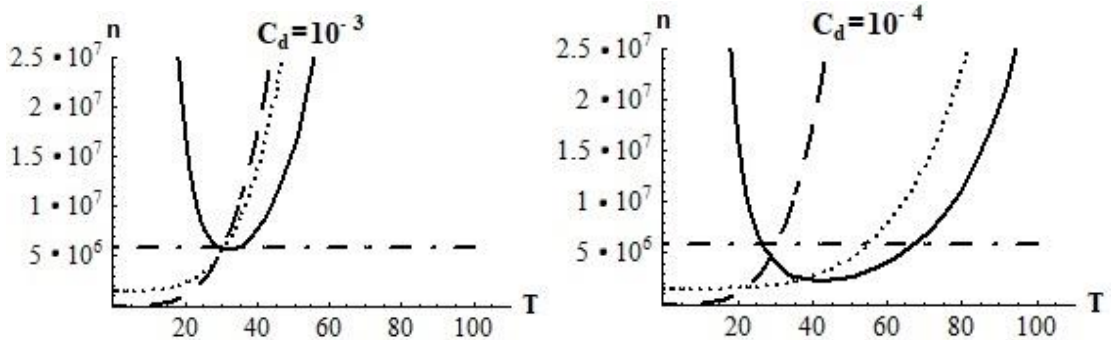
$$\nu_U = 2.3 \cdot T^4 e^{-C_0/T} \int_{X_1}^{X_2} x^6 e^{-x} dx \quad (4.79)$$

Остаточно, після обчислення інтеграла в (4.78), вирази для частот зіткнень в моделі Каллавея приймають вид: $\nu_N = 6,88 T^4 \text{ c}^{-1}$

$$\nu_U = 1,4 \cdot 10^4 T^3 \exp\left(-\frac{670}{T}\right) \text{ c}^{-1} \quad (4.80)$$

$$\nu_{iso} = 7,135 \cdot 10^3 T^4 C_d \text{ c}^{-1}, \quad \nu_B = 1,5 \cdot 10^6 \text{ c}^{-1}$$

Підставляючи вирази (4.80) в нерівність (4.66) ми отримуємо "вікно" існування ХДЗ в монокристалі алмазу в моделі Каллавея. На рисунку 4.4 приведені графіки залежності частоти зіткнень $\nu(T)$ від температури для різних концентрацій ізоотопу ^{13}C :



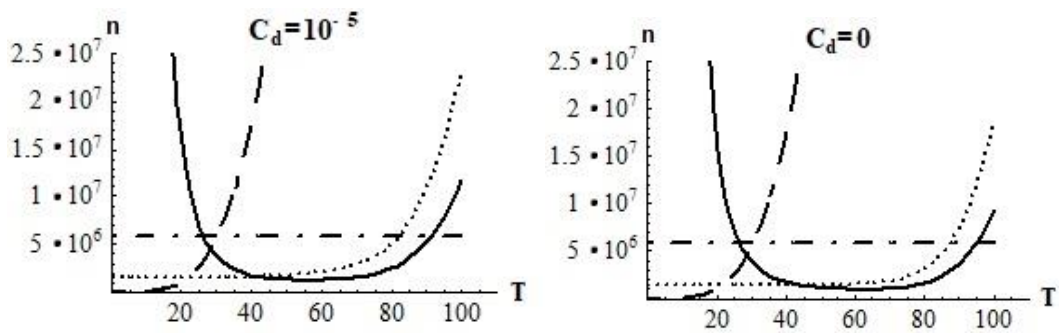


Рис.4.4. Область існування хвиль другого звуку в моделі Каллавея для різних концентрацій ізотопів: а) $C_d = 10^{-3}$ б) $C_d = 10^{-4}$, в) $C_d = 10^{-5}$, г) $C_d = 0$. Суцільна лінія – Γ_{II} , пунктирна лінія – ν_N , точкова лінія – ν_R , штрихпунктирна лінія – частота другого звуку Ω_{II}

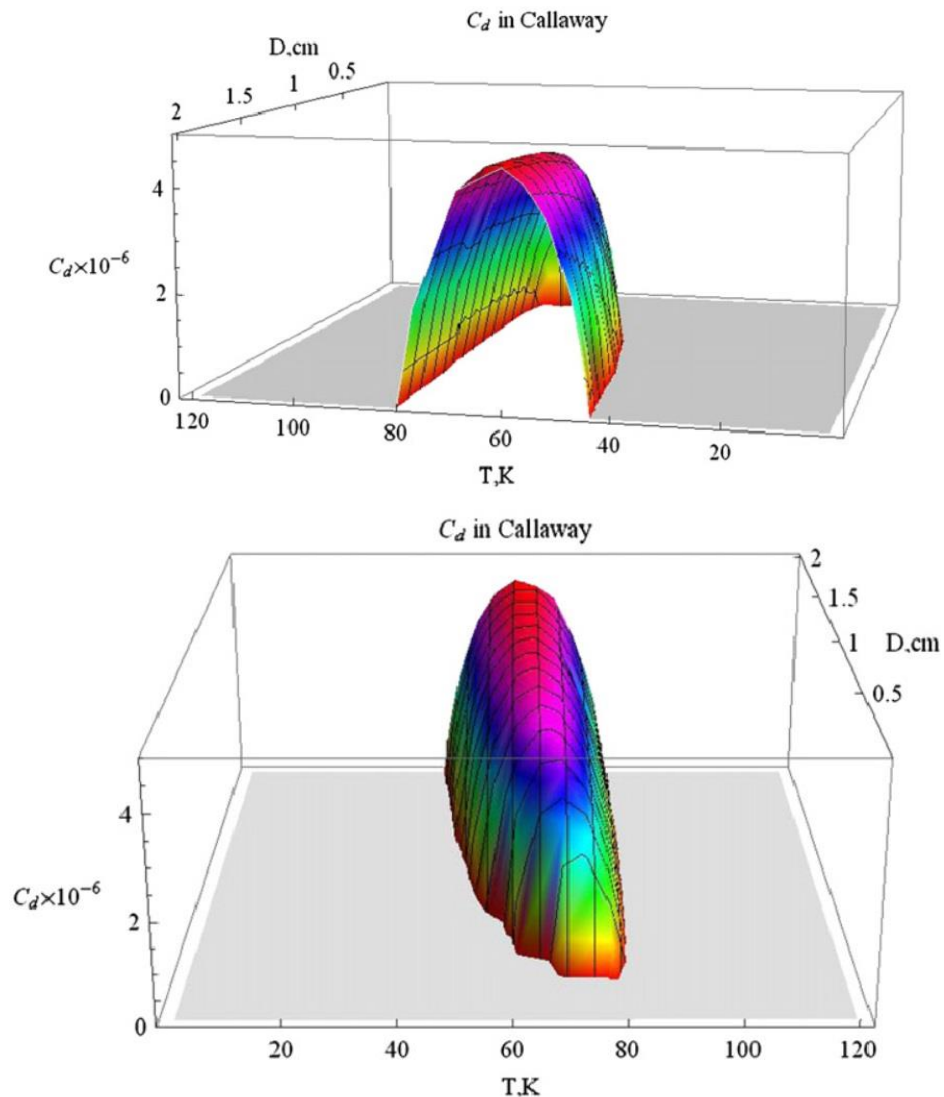


Рис.4.5. Область існування хвиль другого звуку в моделі Каллавея для всіх можливих співвідношень концентрацій ізотопів і розміру зразка.

На рис. 4.5 наведена область існування хвиль другого звуку для всіх можливих співвідношень концентрацій ізотопів вуглецю і розміру зразка в моделі зведеного ізотропного кристала. Хвилі існують при значеннях параметрів під кольоровою поверхнею.

Проведені розрахунки області існування хвиль другого звуку в моделі зведеного ізотропного кристала і моделі Каллавея дають узгоджені результати. Таким чином, можна стверджувати, що ХДЗ в кристалі алмаза можуть бути експериментально виявлені в області температур $30 < T < 80$ К, якщо концентрація ізотопу ^{13}C буде нижче $C_d = 10^{-4}$.

4.5. Розрахунок області існування ХДЗ в LiF в моделі зведеного ізотропного кристала і моделі Калавея

Для проведення чисельних оцінок і обчислення умови існування слабозагасаючих ХДЗ у фториді літію використані наступні дані, розраховані в моделі зведеного ізотропного кристала. Для модулів пружності другого порядку: $\lambda_1 = 3,4 \cdot 10^{10} \text{ Н / м}^2$, $\lambda_2 = 5,15 \cdot 10^{10} \text{ Н / м}^2$, $\beta = 0,613$. Знаючи ці вирази, густину і постійну ґратки фториду літію, які дорівнюють відповідно $\rho = 2,64 \text{ г / см}^3$, $a = 4,02 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, були отримані наступні значення швидкості поздовжніх (l) і поперечних (t) акустичних фононів, середня швидкість звуку:

$$V_l = 7203 \cdot 10^2 \text{ см / с}, V_t = 4416 \cdot 10^2 \text{ см / с}, V_s = 4773 \cdot 10^2 \text{ см / с}.$$

Швидкість другого звуку має вигляд:

$$W_{II} = \sqrt{\frac{V_t^2}{3} \left(\frac{2 + \beta^3}{2 + \beta^5} \right)} = 2636 \cdot 10^2 \text{ см / с}$$

Наведемо значення інших необхідних числових коефіцієнтів для LiF:

$$\alpha_{\eta} = 4,13 \cdot 10^{-2}, \Theta_1 = 326 \text{ К}, \Theta_2 = 346 \text{ К},$$

$$A_1 = 1,7 \cdot 10^{16} \text{ К}^3 / \text{с}, A_2 = 6,9 \cdot 10^{12} \text{ К / с}. \quad (4.81)$$

Вирази для частот зіткнень в моделі зведеного ізотропного кристала мають вигляд для LiF:

$$\begin{aligned}
\nu_N &= 6,6 \cdot T^5 \text{ c}^{-1} \\
\nu_U &= 1,7 \cdot 10^{16} \cdot T^{-3} \exp\left(-\frac{\Theta_1}{T}\right) + 6,9 \cdot 10^{12} \cdot T^{-1} \exp\left(-\frac{\Theta_2}{T}\right) \\
\nu_{iso} &= 3,27 \cdot 10^4 \cdot T^4 C_{iso} \text{ c}^{-1} \\
\nu_{Beff} &= 3,45 \cdot 10^{10} \cdot D^{-2} \cdot T^{-5} \text{ c}^{-1}.
\end{aligned} \tag{4.82}$$

Підставляючи ці вирази в (4.71), отримаємо:

$$C_d \leq 10 \cdot T^{-4} D^{-1} - 1,38 \cdot 10^7 D^{-2} T^{-9} - 5,2 \cdot 10^{11} e^{-326/T} T^{-7} - 2,1 \cdot 10^8 e^{-346/T} T^{-5} \tag{4.83}$$

Область існування ХДЗ в моделі зведеного ізотропного кристала обмежена поверхнею, яка визначається співвідношенням (4.83), і зображена на рисунку 4.6.

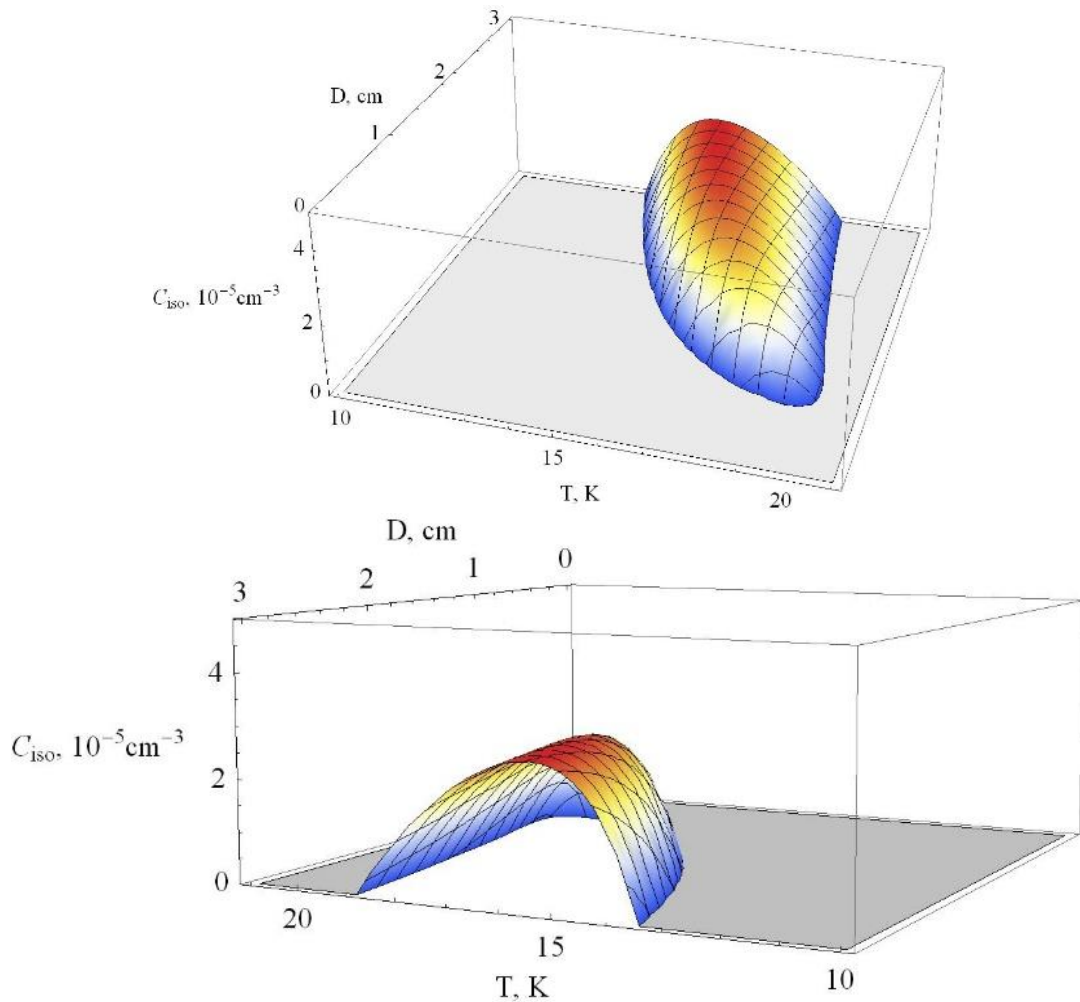


Рис. 4.6. Область існування ХДЗ у фториді літію в моделі зведеного ізотропного кристала знаходиться всередині обсягу обмеженого поверхнею.

Оскільки ХДЗ існують поблизу максимуму теплопровідності, то для визначення області існування ХДЗ ми можемо також використовувати модель Каллавея. У низькотемпературній області в моделі Каллавея [119] для опису експериментальних даних по теплопровідності LiF в роботі [102] використовуються наступні фононні частоти зіткнень, викликані нормальними процесами і процесами перекидання:

$$\begin{aligned}\nu_N &= 2,7 \cdot 10^{-10} \omega T^3 \text{ c}^{-1} \\ \nu_U &= 600 x^2 T^4 e^{-170/T} \text{ c}^{-1},\end{aligned}\quad (4.84)$$

де $x = \hbar \omega / k_B T$.

Провівши процедуру усереднення за правилом (4.76) ми отримаємо такий вираз для усередненої частоти нормальних фононних зіткнень:

$$\nu_N = 167.66 \cdot T^4 \quad (4.85)$$

Інтегрування в чисельнику (4.76) також необхідно проводити з кінцевими межами (4.78), що для фториду літію дає для процесів $l + t \leftrightarrow l + b_g$

$$\nu_U = 23 \cdot T^4 e^{-170/T} \int_{x_1}^{x_2} x^6 e^{-x} dx \quad (4.86)$$

Підставляючи відповідні вирази для частот з формул (4.82), (4.85) і (4.86) в (4.71) ми отримаємо умови для концентрації ізотопів, розміру і температури в моделі Калавея.

$$\begin{aligned}C_{iso} \leq & 10 \cdot T^{-4} D^{-1} - 5.4 \cdot 10^5 D^{-2} T^{-8} - \\ & - e^{-253/T} (2.28 \cdot 10^8 T^{-2} + 1.65 \cdot 10^6 T^{-1} + 10^6 + 4.8 \cdot 10^4 T + 1.7 \cdot 10^3 T^2 + 42 T^3)\end{aligned}\quad (4.87)$$

Область існування ХДЗ в моделі Каллавея зображена на рисунку 4.7.

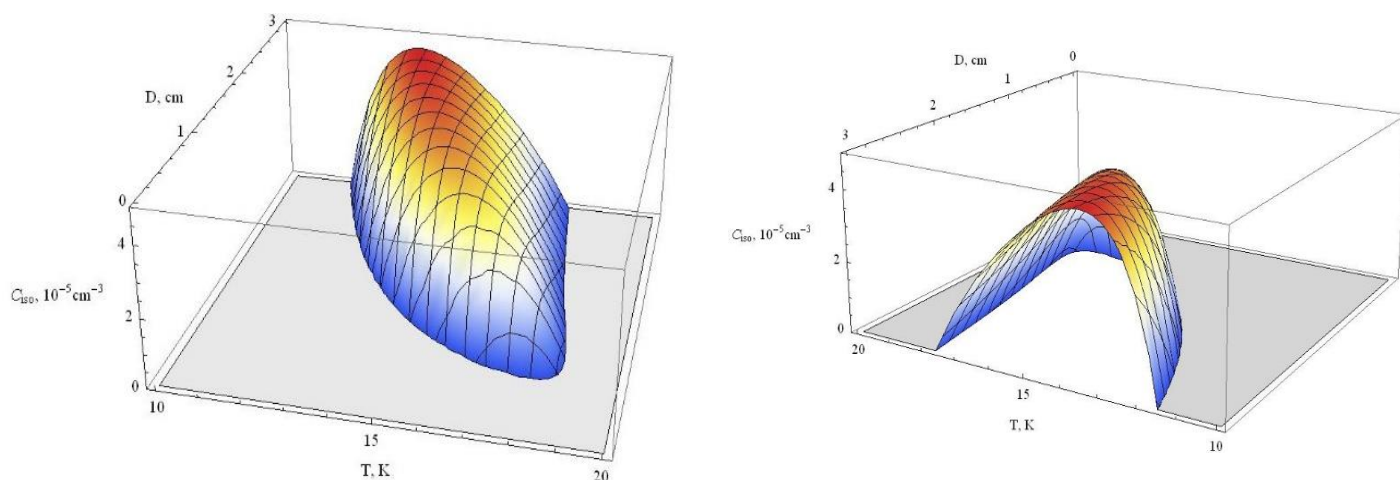


Рис. 4.7. Область існування ХДЗ в моделі Каллавея знаходиться всередині об'єму обмеженого поверхнею.

Проведемо аналіз отриманих результатів, використовуючи графіки наведені на рисунках 4.6 і 4.7. В обох випадках максимальне вікно існування ХДЗ буде при нульовій концентрації ізоотопу ${}^6\text{Li}$. Зі збільшенням концентрації область існування зменшується до нуля при концентраціях $2,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ і вище. З загального вигляду цих графіків витікає таке обмеження на розмір зразка: він не повинні бути менше 0,8 см. Максимальна величина допустимої концентрації ізоотопів для даних розміру і температури на рисунках 4.6 і 4.7 збігається по порядку величини, але в моделі зведеного ізотропного кристала ця величина менше в 2 рази і температурне вікно зрушено в область більш високих температур на 1 градус. Область найбільш ймовірного спостереження ХДЗ в кристалі буде перебувати на перетині областей, обмежених відповідними поверхнями. Проілюструємо ці особливості на наступних прикладах.

На рисунку 4.8 наведена залежність концентрації ізоотопів від температури для двох розмірів зразка $D = 1 \text{ см}$ і $D = 3 \text{ см}$. Дійсно, зі збільшенням розміру зразка температурна область найбільш ймовірного існування збільшується з 1,5 до 4 К і зсувається в область більш низьких температур, а максимальна допустима концентрація зростає з $1,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$ до $2,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-3}$.

На рисунку 4.9 наведено графіки залежності розмірів зразка від температури при заданій концентрації ізоотопів ${}^6\text{Li}$ рівній 10^{-5} см^{-3} . При цьому видно, що мінімальний розмір зразка, в якому можливе поширення ХДЗ, обмежений 0,8 см. Зі збільшенням розміру зразка температурна область збільшується і зсувається в область більш низьких температур. Для зразка з розмірами 1,5 см вона становить 2 К, а для зразка з розміром 3 см – близько 3 К.

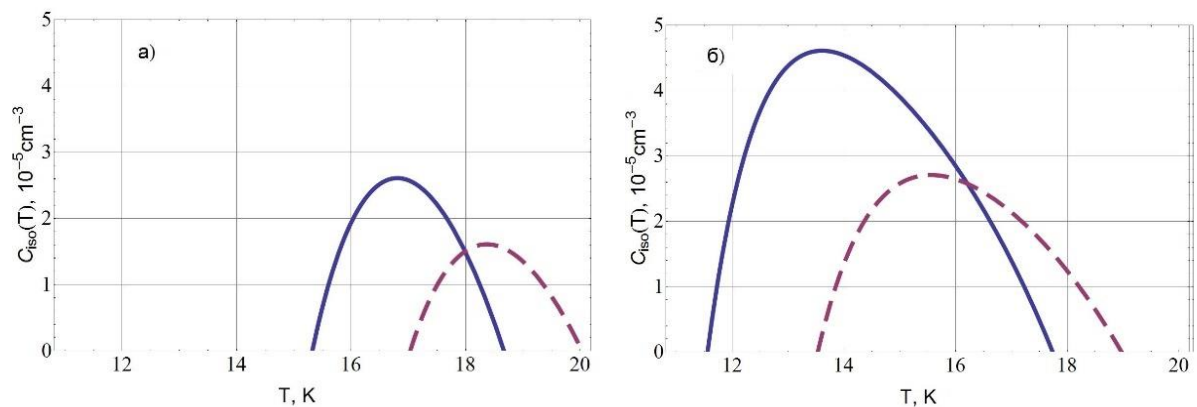


Рис.4.8. Область існування ХДЗ при фіксованому розмірі зразка D . Пунктирна лінія – модель зведеного ізотропного кристала; суцільна – модель Каллавея. а) $D = 1 \text{ см}$; б) $D = 3 \text{ см}$.

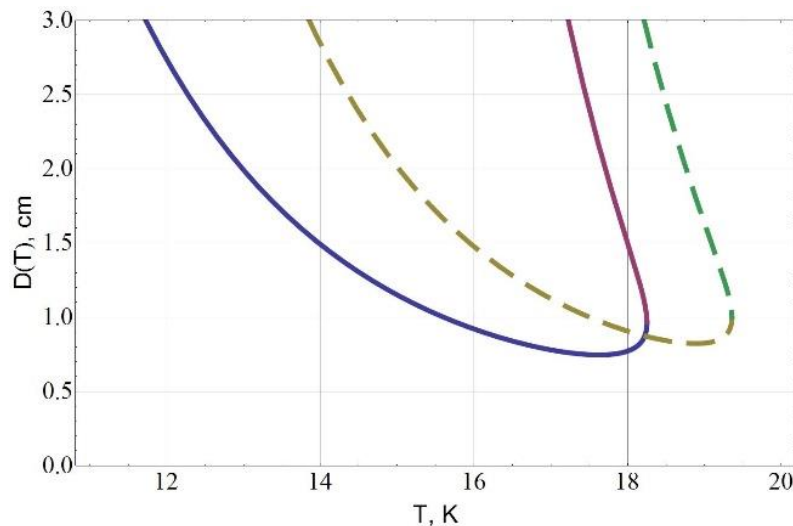


Рис.4.9. Область існування ХДЗ при фіксованій концентрації ізоотопів ${}^6\text{Li}$. Пунктирна лінія – модель зведеного ізотропного кристала; суцільна – модель Каллавея.

Висновки до розділу 4

В розділі здобуто наступні результати:

- визначено внески до часу життя фонона кристалічної ґратки від нормальних процесів, процесів перекидання, зіткнень з ізотопами та границею твердого тіла. Розглянуто випадок, коли переважають нормальні процеси.
- розраховано частоти зіткнень фононів кристалічної ґратки з ізотопами та границею;
- визначено умови розповсюдження хвиль другого звуку в твердих тілах;
- розраховано області існування хвиль другого звуку в ізотопічно збіднених кристалах алмазу та фториду літія. Результати порівняні у двох моделях: зведеного ізотропного кристалу та моделі Калавея.

Результати даної роботи дозволяють підібрати найбільш оптимальні параметри, необхідні для експериментального виявлення хвиль другого звуку в монокристалах фториду літію, ґрунтуючись на порівнянні проведених розрахунків в двох різних моделях.

РОЗДІЛ 5. РІВНЯННЯ ДВОРІДИННОЇ ГІДРОДИНАМІКИ З УРАХУВАННЯМ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

Робота [45], в якій вперше спостерігалось виникнення електричної різниці потенціалів на стінках резонатора при збудженні хвиль другого звуку в надплинному ^4He (He-II), поклала початок новому напрямку у фізиці надплинного гелію – дослідження електричних властивостей He-II. Згідно роботі [45] електричний сигнал в хвилі першого звуку відсутній. З експериментальних результатів, представлених в [45], впливав однозначний висновок, що характерні електричні властивості спостерігаються тільки у хвилі другого звуку, і проявляються лише в надплинному стані гелію. Таким чином, прояв електричної активності гелію міг виявитися пов'язаним з природою виникнення надплинності. Розвиток цієї ідеї призвів до постановки нових експериментів. Зокрема, висунуту в [45] гіпотезу про те, що виникнення електричного потенціалу пов'язане з відносним рухом нормальної і надплинної складових, підтвердили експерименти [46], в яких спостерігалось виникнення електричної різниці потенціалів при торсіонних коливаннях плівки He-II. Низка теоретичних робіт, в яких розглядалися електричні властивості гелію, не проводила несутвердженого пояснення експериментів [45] і більш пізніх робіт [60, 61] .

У зв'язку з цим у дисертаційній роботі вирішена задача про виникнення електричного потенціалу в хвилях другого звуку в надплинному гелії. В даному розділі наведені розрахунки коефіцієнтів, які задають зв'язок між різними величинами, що коливаються в ХДЗ. Матеріали даного розділу опубліковані в [1,3,4].

5.1. Гіпотеза існування дипольного моменту ротонів

Оскільки хвильова функція основного стану атома гелію сферично симетрична [120], то поляризованість гелію виявляється дуже малою [121-123], а діелектрична проникність рідкого гелію близька до одиниці. Квадратичні ефекти поляризації починаються з величини напруженості

електричного поля в 30 кВ/см. В експериментах [60] спостерігалася лінійна залежність розщеплення лінії поглинання НВЧ гелієм від напруженості електричного поля. Оскільки гідродинаміку гелію при температурі більше 0.8 К визначають ротони [16], то природно зв'язати спостережувану поведінку саме з підсистемою ротонів і припустити наявність дипольного моменту у ротонів [3,4]. У рівновазі сумарний дипольний момент дорівнює нулю, як і повний імпульс. У разі, коли на ротони діє зовнішнє поле (надплинної складової, електричне поле) розподіл квазічастинок перестає бути ізотропним, сумарний дипольний момент ротонів перестає бути нульовим, і, як наслідок, проявляється макроскопічна поляризованість гелію, що реєструється у вигляді потенціалу [45,46]. В роботі [60] наводиться оцінка величини дипольного моменту невідомої природи (не внаслідок дії зовнішнього електричного поля), що приводить до розщеплення лінії поглинання НВЧ гелієм.

Будемо вважати механізм виникнення дипольного моменту ротонів інерційним [69], тобто такого що виникає внаслідок суттєвої відмінності мас двох електронів атома гелію і ядра, маса якого на три порядки більша. При дії на обраний атом сили електричної природи прискорення одержувані електронною оболонкою і ядром також будуть відрізнятися на три порядки. Оскільки ротон є локалізованим збуренням густини гелію без центральної симетрії (імовірно з аксіальною симетрією) [67], то вплив, який вчиняється на обраний атом з боку сусідніх, є не компенсованим, що і є умовою інерціального механізму. У цьому полягає ймовірне джерело виникнення дипольного моменту ротонів. Пізніше ми отримаємо збіг його величини з оцінкою в [60]. Передбачувана вісь симетрії ротонів спрямована уздовж лінії групова швидкість-імпульс. Усереднений по періоду коливань (власного руху) ротонів [63] дипольний момент отримаємо уздовж цієї лінії в напрямку групової швидкості ротонів

$$\vec{d} \sim \vec{v}_{gr} = \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial \vec{p}}, \quad (5.1)$$

де

$$\varepsilon(\rho) = \varepsilon(\rho, \vec{E} = 0, \vec{v}_s = 0) = \Delta(\rho) + \frac{(p - p_0)^2}{2\mu} \quad (5.2)$$

Тут, $\varepsilon_0 = \varepsilon(\rho_0)$ є енергія ротонів при рівноважних значеннях зовнішніх полів, $\rho_0 = 0.13 \text{ г/см}^3$ густина рідкого гелію при тиску насичених парів; $\Delta(\rho_0) = 8,65^\circ \text{ K}$, $p_0/\hbar = 1,9 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$, $\mu = 0,16 m_{\text{He}} = 2 \cdot 10^{-24} \text{ г}$. Визначення (5.1) приводить до замкнутої термодинаміки квазічастинок і середовища.

Складемо коефіцієнт пропорційності з величин характерних для ротонів, а саме

$$\vec{d} = \gamma \frac{2e\hbar}{\Delta} \frac{(p - p_0)}{\mu} \frac{\vec{p}}{p} = \alpha \frac{(p - p_0)}{\mu} \frac{\vec{p}}{p}, \quad (5.3)$$

де γ - безрозмірний коефіцієнт, що виявляється порядку одиниці. Введення двійки в визначення коефіцієнта враховує, що заряди диполя рівні $\pm 2e$ (електронної оболонки і ядра). Плече диполя менше атомного розміру $r < a = 0.3 \text{ Å}$ [120].

5.2. Знаходження рівнянь 2х-рідинної гідродинаміки з урахуванням електричного поля

У кінетичній теорії стан газу квазічастинок характеризується функцією розподілу квазічастинок $N = N^{(j)}(\vec{k}, \vec{r}, t)$, яка задає кількість квазічастинок сорту j в момент часу t в фазовому об'ємі $d\vec{k}d\vec{r}$, де $\vec{k}$ – імпульс квазічастинки. (Постійна Планка $\hbar$ в подальшому, для простоти, покладена такій що дорівнює одиниці, $\hbar = 1$). Функція розподілу N задовольняє кінетичному рівнянню, яке має вигляд рівняння Больцмана:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{g} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial \omega}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right) N = (\dot{N})_{cm} \quad (5.4)$$

Тут $\vec{g} \equiv \vec{g}^{(j)} = \partial \omega^{(j)} / \partial \vec{k}$ – групова швидкість квазічастинок; $\omega \equiv \omega^{(j)}(\vec{k}, \vec{r}, t)$ – гамільтоніан квазічастинки, що співпадає з її локальною енергією; $(\dot{N})_{cm}$ –

інтеграл зіткнень квазічастинок, який враховує процеси зіткнення, злиття, розпаду і випромінювання квазічастинок.

Це рівняння було вперше використано А.І. Ахиезером в роботі [38] для опису нерівноважного стану системи фононів в кристалах, його строгий вивід і умови застосовності отримані в роботі [124], з якої випливає, що рівняння (5.4) може бути застосовано в області, де справджується гідродинамічний опис поведінки газу квазічастинок.

Умови застосовності рівняння (5.4) включають нерівності:

$$\omega\tau \gg 1, \quad kl \gg 1, \quad (5.5)$$

де $\tau \equiv \tau^{(j)}$ – характерний час між двома зіткненнями квазічастинок, а $l \equiv l^{(j)} = g^{(j)}\tau^{(j)}$ – довжина вільного пробігу квазічастинок.

Просторово-часова залежність енергії ω обумовлена залежністю параметрів середовища від змінних зовнішніх полів. Набір цих параметрів, які можуть бути скалярами, векторами, тензорами або функціоналами від певних величин позначимо $\hat{A}$. Цей символ буде служити і для позначення різних операцій над відповідними величинами.

В умовах слабкої просторової неоднорідності зовнішніх полів, тобто коли масштаб неоднорідності L_c значно більше характерних довжин хвиль квазічастинок λ , і повільній зміні у часі сторонніх полів, тобто коли характерні часи зовнішніх полів t_c значно більші характерних періодів коливань квазічастинок T

$$L_c \gg \lambda, \quad t_c \gg T, \quad (5.6)$$

величину $\hat{A}$ можна представити у вигляді:

$$\hat{A} = \hat{A}_0 + \delta\hat{A}, \quad (5.7)$$

де $\hat{A}_0$ – величина $\hat{A}$ за відсутності сторонніх полів, а $\delta\hat{A}$ – варіація величини $\hat{A}$ змінними зовнішніми полями. Це призводить до появи явної залежності енергії квазічастинки від просторової ($\vec{r}$) змінної і часу (t).

Умови (5.6) є умовами адіабатичної зміни параметрів середовища і разом з умовами (5.5) є умовами застосовності рівняння (5.4). Вони означають також, що рівняння (5.4) може бути застосовано в області, де справджується газодинамічний опис поведінки газу квазічастинок.

Використовуючи введені позначення, запишемо енергію квазічастинки сорту j з хвильовим вектором $\vec{k}$ за малої адіабатичної зміни параметрів, від яких вона залежить, у вигляді [19]:

$$\omega^{(j)}(\vec{A}, \vec{k}) = \omega_0^{(j)}(\vec{A}_0, \vec{k}) (1 + \hat{a}^{(j)}), \quad (5.8)$$

де $\hat{a}^{(j)} \equiv \hat{a}^{(j)}(\vec{k}, \vec{r}, t)$ – глибина модуляції енергії квазічастинки сторонніми полями, дорівнює

$$\hat{a}^{(j)} = \left(\frac{\partial}{\partial \vec{A}} \ln \omega \right)_{\vec{A}=\vec{A}_0} \delta \vec{A}. \quad (5.9)$$

Умови адіабатичності зміни параметрів означають, що

$$\left| \tau^{(j)} \frac{d}{dt} \ln |\hat{a}^{(j)}| \right| \ll 1, \quad \left| \tau^{(j)} \frac{d\omega_0^{(j)}}{d\vec{k}} \cdot \nabla \ln |\hat{a}^{(j)}| \right| \ll 1. \quad (5.10)$$

Ліва, кінематична частина рівняння (5.4) має формально такий же вигляд як і кінематична частина класичного рівняння [103-105,124,125], якщо під $\omega(\vec{k}, \vec{r}, t)$ розуміти гамільтоніан квазічастинки.

Інтеграл зіткнень в (5.4) істотно відрізняється від класичного інтеграла зіткнень, так як в квантових переходах, що враховуються в ньому, відбивається характер статистики, якій підпорядковуються квазічастинки, і періодична структура середовища в разі кристалів. Запишемо інтеграли зіткнення за участю трьох квазічастинок в процесах розпаду, злиття і випромінювання, і чотирьох квазічастинок в процесах розсіяння.

Ці інтеграли для бозе-квазічастинок сорту j_p з квазіімпульсом $\vec{k}_p$ запишемо у вигляді [19,20]:

$$\left(\dot{N}_p^{(4)} \right)_{cm} = \frac{\pi}{4} \sum_{1,2,3,4,\vec{r}} |\Phi(1,2;3,4)|^2 \cdot \Delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4 - 2\pi\vec{r}) \cdot (\delta_{p1} + \delta_{p2} - \delta_{p3} - \delta_{p4}) \times$$

$$\times \delta(\omega_1 + \omega_2 - \omega_3 - \omega_4) \cdot \{(1 + N_1)(1 + N_2)N_3N_4 - N_1N_2(1 + N_3)(1 + N_4)\} . \quad (5.11)$$

У цих формулах $\Phi(1,2;3,4)$ амплітуди переходів $1 + 2 \leftrightarrow 3 + 4$ квазічастинок в гамільтоніанах взаємодії

$$H^{(4)} = \sum_{1,2,3,4,\vec{\tau}} \Phi(1,2;3,4) \cdot \Delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4 - 2\pi\vec{\tau}) \cdot \hat{c}_1^+ \cdot \hat{c}_2^+ \cdot \hat{c}_3 \cdot \hat{c}_4 + \text{э.с.} . \quad (5.12)$$

Тут $\hat{c}_p^+$, $\hat{c}_p$ – оператори народження і знищення квазічастинок;

$$\Delta(\vec{k}) = \begin{cases} 1 & \text{при } \vec{k} = 0 \\ 0 & \text{при } \vec{k} \neq 0 \end{cases} ; \vec{\tau} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3 ,$$

де $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$, $\vec{b}_3$ – базисні вектори оберненої ґратки; n_1, n_2, n_3 – довільні цілі числа. Підсумовування по цілим числам $1, 2, 3, \dots, p$ означає одночасне підсумовування по імпульсам і сортам квазічастинок: $1 \equiv (\vec{k}_1, j_1), 2 \equiv (\vec{k}_2, j_2), \dots, p \equiv (\vec{k}_p, j_p)$. Підсумовування по $\vec{\tau} \neq 0$ враховує процеси перекиду (U -процеси), що відбуваються в кристалах.

При відсутності сторонніх полів розв'язком кінетичного рівняння (5.4), що звертають в нуль інтеграл зіткнень, є рівноважна планківська функція розподілу

$$\bar{N}^{(j)} = \left(\exp \frac{\omega_0^{(j)}}{T_0} - 1 \right)^{-1} , \quad (5.13)$$

де T_0 – рівноважна температура.

Будемо вважати надалі, що в розглянутій нами швидко релаксуючій системі квазічастинок визначальними є процеси взаємодії квазічастинок при яких енергія і імпульс зберігаються. Такі процеси взаємодії називаються нормальними (N -процеси).

Незбереження імпульсу і енергії пов'язано із взаємодією квазічастинок, наприклад, з частинками, що призводить до їх загасання, або пов'язане з процесами перекидання, розсіюванням квазічастинок на домішках, дефектах кристалів і ін.

Позначимо через τ_N характерний час взаємодії квазічастинок за рахунок N -процесів, а через τ_R – характерний час взаємодії квазічастинок за рахунок процесів, в яких повний імпульс не зберігається. Тоді умова того, що нормальні процеси є визначальними запишеться в наступному вигляді:

$$\tau_N \ll \tau_R . \quad (5.14)$$

Така ситуація має місце, зокрема, в чистих кристалах і в квантових рідинах в області низьких температур [16,18,20].

Якщо в деякий момент часу система квазічастинок виведена зі стану рівноваги, то в ній за часів τ_N встановлюється квазілокальна рівновага, що характеризується функцією розподілу $N_0^{(j)}$, що звертає в нуль інтеграл зіткнень за рахунок N -процесів і має вигляд [20]:

$$N_0^{(j)} = \left(\exp \frac{\omega^{(j)} - (\vec{k}\vec{u}) - \mu_{j^*} \delta_{jj^*}}{T} - 1 \right)^{-1} , \quad (5.15)$$

причому символ j^* означає сорт квазічастинок для яких процеси взаємодії відбуваються зі збереженням їх числа, а величина δ_{jj^*} відмінна від нуля і дорівнює одиниці тільки для таких процесів.

У стані газу квазічастинок, близьких до локального статистичному рівновага розв'язок рівняння (5.4) в газодинамічному наближенні, шукаємо у вигляді:

$$N^{(j)} = N_0^{(j)} + \delta N^{(j)} , \quad (|\delta N^{(j)}| \ll N_0^{(j)}) , \quad (5.16)$$

де $N_0^{(j)}$ – локально-рівноважна функція розподілу (5.15), що залежить від газодинамічних величин, а $\delta N^{(j)}$ залежить і від їх градієнтів. Надалі для знаходження $\delta N^{(j)}$ буде зручно записати його в наступному вигляді:

$$\delta N^{(j)} = N_0^{(j)} (1 + N_0^{(j)}) \psi^{(j)} , \quad (5.17)$$

де $\psi^{(j)}$ – невідома функція ($\psi^{(j)} \equiv \psi^{(j)}(\vec{k}, \vec{r}, t)$). Величини $\vec{u}, T, \mu_{j^*}$, що визначають $N_0^{(j)}$ (5.15) є, взагалі кажучи, деякими функціями $\vec{r}$ і t . Для усунення невизначеності функції $N_0^{(j)}$ поставимо умови:

$$\sum_{\vec{k},j} \vec{k} \delta N^{(j)} \equiv \langle \vec{k} \psi \rangle = 0; \sum_{\vec{k},j} \omega^{(j)} \delta N^{(j)} \equiv \langle \omega \psi \rangle = 0; \sum_{\vec{k},j} \delta N^{(j)} \equiv \langle \psi \rangle_{j^*} = 0. \quad (5.18)$$

Тут під $\langle \dots \rangle$ розуміється підсумовування виду:

$$\langle f \rangle = \sum_j \langle f \rangle_j; \langle f \rangle_j = \sum_{\vec{k}} f^{(j)} N_0^{(j)} (1 + N_0^{(j)}). \quad (5.19)$$

Умови (5.18) дозволяють інтерпретувати $\vec{u}, T, \mu_{j^*}$ як дрейфову швидкість, локальну температуру і хімічний потенціал газу квазічастинок, тобто як термодинамічні змінні, що характеризують стан неповної термодинамічної рівноваги системи. Крім того умови (5.18) є і умовами розв'язання рівняння (5.4) для функції ψ .

Запишемо інтеграл зіткнень у вигляді суми інтегралів зіткнень за рахунок N - і U - процесів.

$$(\dot{N}_p)_{cm} = L_N(N_p) + L_U(N_p). \quad (5.20)$$

Підставляючи $N^{(j)}$ (5.16) в кінетичне рівняння Больцмана (5.4) і зберігаючи тільки лінійні по $\delta N^{(j)}$ доданки в інтегралі зіткнень, отримаємо з урахуванням нерівності (5.14) лінеаризоване кінетичне рівняння Больцмана

$$N_{0p} (1 + N_{0p}) \delta_p = L_N(\delta N) + L_U(N_0), \quad (5.21)$$

де

$$\delta_p = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{g}_p \frac{\partial}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial \omega_p}{\partial \vec{r}} \frac{\partial}{\partial \vec{k}_p} \right) z_p, \quad (5.22)$$

$$a z_p = \frac{\omega_p - (\vec{k}_p \vec{u}) - \mu_{j^*} \delta_{jpj^*}}{T}. \quad (5.23)$$

У рівнянні (5.21) нехтують внеском ψ в кінематичну частину лінеаризованого кінетичного рівняння внаслідок слабкої неоднорідності і повільної зміни величин за часом (5.6).

Густина термодинамічного потенціалу квазічастинок F_0 як функцію T , $\vec{u}$, $\hat{A}_j$ розраховується за відомою формулою [92]:

$$F_0 = -V^{-1} T \int \ln(1 + N_0) d\tau_p, \quad (5.24)$$

і задовольняє термодинамічній тотожності:

$$dF_0 = -S_0 dT - \vec{P} d\vec{u} + \sum_j \hat{B}_j d\hat{A}_j, \quad (5.25)$$

З (5.25) знаходимо густини імпульсу $\vec{P}$, теплоємності C і ентропії S , величин $\hat{B}_j$, компоненти тензора щільності квазічастинок $\tilde{\rho}_{ij}$:

$$\begin{aligned} \vec{P} &= -\left(\frac{\partial F_0}{\partial \vec{u}}\right)_{T, \hat{A}}; \quad S_0 = -\left(\frac{\partial F_0}{\partial T}\right)_{\vec{u}, \hat{A}}; \quad C = T \left(\frac{\partial S_0}{\partial T}\right)_{\vec{u}, \hat{A}}; \\ \hat{B}_j &= \left(\frac{\partial F_0}{\partial \hat{A}_j}\right)_{T, \vec{u}}; \quad \tilde{\rho}_{il} = \frac{\partial \bar{P}_i}{\partial u_l} = -\left(\frac{\partial^2 F_0}{\partial u_i \cdot \partial u_l}\right)_{T, \hat{A}}. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Використовуючи співвідношення (5.24), (5.26) і умови (5.7) і (5.16)

$$\text{отримаємо } \hat{B}_j = \int d\tau_{\vec{p}} N_0 \frac{\partial \varepsilon}{\partial A_j} = \int d\tau_{\vec{p}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial A_j} \bar{N} \left(1 - \frac{(\bar{N} + 1)}{T_0} \left(\sum_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial A_j} \delta A_j - \vec{p} \cdot \vec{u} - \varepsilon_0 \Theta \right) \right),$$

$$\vec{P} = \int d\tau_{\vec{p}} N_0 \vec{p} = \int d\tau_{\vec{p}} \bar{N} \frac{(\bar{N} + 1)}{T_0} \vec{p} (\vec{p} \cdot (\vec{u} - \vec{v})), \quad (5.27)$$

$$S_0 = \bar{S} - \int d\tau_{\vec{p}} \frac{\varepsilon_0}{T_0} \bar{N} \frac{(\bar{N} + 1)}{T_0} \left(\sum_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial A_j} \delta A_j - \vec{p} \cdot \vec{u} - \varepsilon_0 \Theta \right),$$

де $\bar{S} = \int d\tau_{\vec{p}} \frac{\varepsilon_0}{T_0} \bar{N}$, ε_0 – термодинамічно рівноважна енергія квазічастинок, і

введено наступне позначення: $\int d\tau_{\vec{p}} \dots = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\vec{p} \dots$.

У роботі [19] були отримані рівняння переносу газу квазічастинок. Запишемо їх без урахування дисипації:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_i}{\partial t} + \frac{\partial P_i u_l}{\partial x_l} - \frac{\partial F_0}{\partial x_i} + \sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{\partial U}{\partial t} + \text{div}(U - F_0) \vec{u} - \sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial t} &= 0, \end{aligned} \quad (5.28)$$

де $U = F_0 + S_0 T + \vec{P} \cdot \vec{u}$ – густина внутрішньої енергії газу квазічастинок.

Зокрема, перепишемо (5.13) для ротонов з енергією (5.2)

$$\bar{N} = \left(\exp \frac{\varepsilon_0}{T_0} - 1 \right)^{-1}, \quad (5.29)$$

термодинамічно рівноважна функція розподілу ротонів.

Квазілокальну рівновагу в газі квазічастинок, яка встановлюється за часи τ_{rr} ротон-ротоної взаємодії, як і раніше характеризується функцією розподілу N_0 (5.15):

$$N_0 = \left(\exp \frac{\varepsilon(\rho, \vec{E}, \vec{v}_s) - \vec{p} \vec{v}_n}{T} - 1 \right)^{-1}, \quad (5.30)$$

де $\varepsilon(\rho, \vec{E}, \vec{v}_s) = \varepsilon(\rho) + \vec{p} \vec{v}_s - \vec{d} \vec{E}$, $\vec{d}$ – дипольний момент ротонів, $\vec{E}$ – напруженість електричного поля, $\vec{v}_s$ – швидкість надплинної складової, $\vec{v}_n$ – швидкість нормальної складової (дрейфова швидкість в газі квазічастинок), $T = T_0 + \delta T$, або вводячи безрозмірну відносну температуру $\theta = \theta(\vec{r}, t) = \frac{\delta T}{T_0}$, $T = T_0(1 + \theta)$. Роль параметрів, позначених символом $\hat{A}$,

грають густина ρ , надплинна швидкість $\vec{v}$ і електричне поле $\vec{E}$. Тоді

$$\sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial x_i} = \tilde{\mu} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \vec{P} \frac{\partial \vec{v}}{\partial x_i} - \frac{\tilde{D}}{4\pi} \frac{\partial \vec{E}}{\partial x_i} \quad \text{і} \quad \sum_j \hat{B}_j \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial t} = \tilde{\mu} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{P} \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} - \frac{\tilde{D}}{4\pi} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (5.31)$$

де

$$\tilde{\mu} = \frac{\partial F_0}{\partial \rho} = \int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \bar{N} \left(1 - \frac{(\bar{N} + 1)}{T_0} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{E}} \delta \vec{E} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \delta \rho - \vec{p} \cdot \vec{w} - \varepsilon_0 \Theta \right) \right) \quad (5.32)$$

– внесок в хімічний потенціал від квазічастинок,

$$\tilde{D} = -4\pi \frac{\partial F_0}{\partial \vec{E}} = -4\pi \int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{E}} \bar{N} \left(1 - \frac{(\bar{N} + 1)}{T_0} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{E}} \delta \vec{E} + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \delta \rho - \vec{p} \cdot \vec{w} - \varepsilon_0 \Theta \right) \right) \quad (5.33)$$

– внесок в вектор електричної індукції від квазічастинок. Тут $\vec{w} = \vec{u} - \vec{v}$ – відносна швидкість нормальної і надплинної складових He-II.

Визначимо густини термодинамічних потенціалів аналогічно [92]

$$F = U_0(\rho) + F_0; \quad E_0 = U + U_0 - \vec{P} \vec{v}, \quad (5.34)$$

де $U_0(\rho)$ – густина енергії рідини при $T = 0$; $dU_0 = \mu_0 d\rho$; μ_0 – хімічний потенціал рідини при $T = 0$. (Зауважимо, що T_0 , U і P дорівнюють нулю при $T = 0$). Сума $U + U_0$ дорівнює густині енергії рідини в лабораторній системі

координат, E_0 – в системі координат, супутньої надплинного руху рідини. Справджується наступна термодинамічна тотожність

$$dE_0 = TdS_0 + (\bar{u} - \bar{v})d\bar{P} + \mu d\rho - \frac{\tilde{D}}{4\pi}d\bar{E}, \quad (5.35)$$

де $\mu = \mu_0 + \tilde{\mu}$ – хімічний потенціал рідини.

Врахувавши всі зауваження і заміни, запишемо систему гідродинамічних рівнянь для квазічастинок в надплинному He II в вигляді

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}(P_i u_i - F \delta_{ii}) - \mu \frac{\partial \rho}{\partial x_i} + \frac{\tilde{D}_j}{4\pi} \frac{\partial E_j}{\partial x_i} - P_j \frac{\partial v_j}{\partial x_i}, \quad (5.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(U + U_0) = -\text{div}[\bar{u}(S_0 T + \bar{P}\bar{u})] + \mu \dot{\rho} + \bar{P}\dot{\bar{v}} - \frac{\tilde{D}}{4\pi}\dot{\bar{E}},$$

Очевидно, що навіть за відсутності дисипації система цих двох рівнянь не є замкнутою. До них необхідно додати рівняння для $\rho, \bar{v}$ і $\bar{E}$. Одним з них є рівняння збереження маси рідини

$$\dot{\rho} + \text{div} \vec{j} = 0, \quad (5.37)$$

де $\vec{j}$ – густина потоку маси рідини, яка, згідно з зауваженням Ландау [106] дорівнює густині її повного імпульсу

$$\vec{j} = \bar{P} + \rho \bar{v} = \rho_n \bar{u} + \rho_s \bar{v}, \quad (5.38)$$

де $\rho_n = \tilde{\rho}$ – густина нормальної складової рідини.

З визначення $\bar{P}$ видно, що густина імпульсу газу квазічастинок є функцією різниці $\bar{u} - \bar{v}$ і може бути представлена у вигляді $\bar{P} = \rho_n(\bar{u} - \bar{v})$, а густина потоку $\vec{j}$ у вигляді $\vec{j} = \rho_n \bar{u} + \rho_s \bar{v}$, де $\rho_s = \rho - \rho_n$ – густина надплинної складової рідини. Виключаючи в законі збереження повного імпульсу $\dot{\bar{P}}$ і, $\dot{\rho}$ отримаємо

$$\dot{j}_i = -\frac{\partial}{\partial x_i}(P_i u_i - F \delta_{ii} + \mu \rho \delta_{ii} + v_i j_i) + \rho \left(\dot{v}_i + \nabla_i \left(\mu + \frac{v^2}{2} \right) \right) - [\vec{j}, \text{rot} \vec{v}]_i + \frac{\tilde{D}_j}{4\pi} \frac{\partial E_j}{\partial x_i}. \quad (5.39)$$

Звідси випливає, що при потенційному русі надплинної складової рідини ($\text{rot} \vec{v} = 0$), закон збереження імпульсу буде виконуватися, якщо

$$\dot{\mathbf{v}} + \nabla \left(\mu + \frac{v^2}{2} \right) = 0. \quad (5.40)$$

Це ж співвідношення можна отримати з умови виконання закону збереження щільності енергії надплинної рідини $E = \frac{\rho v^2}{2} + U + U_0 + \frac{\vec{E}\vec{D}}{4\pi}$

$$\dot{E} = -\text{div} \left[\vec{u} (S_0 T + \vec{P}\vec{u}) + \vec{j} \left(\frac{v^2}{2} + \mu \right) \right] + \vec{j} \left(\dot{\mathbf{v}} + \nabla \left(\mu + \frac{v^2}{2} \right) \right) + \frac{\vec{E}\dot{\vec{D}}}{4\pi}. \quad (5.41)$$

Доповнивши рівняння (5.37), (5.39), (5.40) рівняннями Максвелла в квазістатичному наближенні і, ввівши $\sigma = S/\rho$ і величину $p = \mu\rho - F$, яку можна інтерпретувати, як тиск рідини, отримаємо замкнену систему рівнянь, без урахування дисипації

$$\begin{aligned} \dot{\rho} + \text{div} \vec{j} &= 0; \\ \dot{j}_i + \frac{\partial}{\partial x_i} (P_i u_i + p \delta_{il} + v_i j_l) &= \frac{\tilde{D}_j}{4\pi} \frac{\partial E_j}{\partial x_i}; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\sigma \rho) + \text{div} (\sigma \rho \vec{u}) &= 0; \\ \dot{\mathbf{v}} + \nabla \left(\mu + \frac{v^2}{2} \right) &= 0; \\ \text{rot} \vec{E} &= 0; \quad \text{div} \vec{D} = 0; \quad \dot{\vec{D}} = 0, \end{aligned} \quad (5.42)$$

5.3. Поляризація надплинного гелію при поширенні ХДЗ.

Із закону збереження повного імпульсу знайдемо інші рівняння. Диференціюючи $\vec{j}$ за часом і, виключаючи $\dot{\rho}$ і $\dot{\vec{j}}_0$ за допомогою рівнянь (5.42), отримаємо:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} j_i &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho_n v_{ni} v_{nl} + \rho_s v_{si} v_{sl} - \alpha \rho_n (v_{si} E_l + v_{sl} E_i) - (F - \tilde{\mu}\rho) \delta_{il} - \left(\frac{\varepsilon_0}{4\pi} + \alpha^2 \rho_n \right) E^2 \delta_{il} \right] - \\ &\quad - [\vec{j}, \text{rot} \vec{v}_s] + \rho \left[\frac{\partial v_{si}}{\partial t} + \nabla_i \left(\mu - \frac{v_s^2}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (5.43)$$

З (18) випливає, що закон збереження імпульсу буде виконуватися, якщо:

$$[\mathbf{j}, \text{rot} \mathbf{v}_s] = 0 \quad (5.44)$$

і вже наявне в (5.42) рівняння для надплинної складової. Рівняння (5.53) при цьому запишеться у вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t} j_i = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho_n v_{ni} v_{ni} + \rho_s v_{si} v_{si} - \alpha \rho_n (v_{si} E_l + v_{sl} E_i) - P \delta_{il} - \left(\frac{\varepsilon_0}{4\pi} + \alpha^2 \rho_n \right) E^2 \delta_{il} \right] \quad (5.45)$$

При отриманні останнього рівняння ми використовували рівняння Максвелла для поздовжнього поля.

Скористаємося лінеаризованою системою рівнянь дворідинної гідродинаміки гелію для знаходження поляризації другим звуком [1]

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j} = -\nabla P; & \dot{\rho} + \text{div} \mathbf{j} = 0; \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{v}_s + \nabla \mu = 0; & \frac{\partial}{\partial t} S_0 + \bar{S} \cdot \text{div} \mathbf{v}_n = 0; \\ \frac{\partial (\varepsilon(0) \mathbf{E} - 4\pi \alpha \mathbf{j}_0)}{\partial t} = 0; & \text{div} (\varepsilon(0) \mathbf{E} - 4\pi \alpha \mathbf{j}_0) = 0. \end{cases} \quad (5.46)$$

Із системи (5.46) можна отримати співвідношення:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= -\frac{4\pi \alpha \bar{S}}{\varepsilon_0} \nabla T = \frac{4\pi \alpha \rho_n}{\varepsilon_0 + 4\pi \alpha^2 \rho_n} \cdot \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} \\ \frac{\partial \mathbf{j}_0}{\partial t} &= -S \nabla T \end{aligned} \quad (5.47)$$

з яких випливає, що $\alpha(-t) = -\alpha(t)$, тобто енергія квазічастинки залишається інваріантною щодо операції інверсії часу.

Виключаючи з перших рівнянь швидкості $\mathbf{v}_n$ і $\mathbf{v}_s$, використовуючи тотожність для хімічного потенціалу в лінійному наближенні $\rho d\mu = dP - S_0 dT$, отримаємо рівняння, що описують поширення хвиль першого та другого звуку:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} - \Delta P &= 0, \\ \frac{\partial^2 S_0}{\partial t^2} &= \frac{\rho_s}{\rho_n} S_0^2 \Delta T + \frac{S_0}{\rho} \Delta P. \end{aligned} \quad (5.48)$$

Переходячи до Фур'є компонентів в рівнянні (5.47) і вводячи фазову швидкість хвиль співвідношенням $u = \omega/k$ і з огляду на поздовжність електричного поля, отримаємо зв'язок:

$$\varepsilon(0)E = \frac{4\pi\bar{S}\alpha}{u}T' \quad (5.49)$$

В ході аналізу експериментальних даних в роботі [46] був отриманий наступний зв'язок між коливанням температури T' і потенціалу електричного поля ΔU в ХДЗ: $\frac{\Delta U}{T'} \approx \frac{2e}{k_B}$. У цій роботі використовувалося поздовжнє електричне поле і враховувався його вплив на поширення хвиль другого звуку. В силу геометрії резонатора зв'язок електричного поля з потенціалом виявляється лінійним:

$$E = \Delta U / l, \quad (5.50)$$

де $l = 2,8 \text{ см}$ – довжина резонатора. З (5.33) з функцією розподілу (5.29) випливає зв'язок поляризації та відносної швидкості компонент

$$\vec{P} = \frac{2\alpha}{9} \vec{w} N_r \quad (5.51)$$

де $\vec{w}$ – амплітуда відносної швидкості в другому звуці, α з (5.3)

$$\alpha = \frac{2e\hbar}{\Delta} \quad (5.52)$$

Зв'язок амплітуди відносної швидкості і коливань температури T' в другому звуці наведемо з використанням характеристик гелію при $T = 1,4 \text{ К}$ [16]. А саме, вважаючи, що швидкість другого звуку дорівнює $u_2 \approx 19,7 \text{ м/с}$, а ентропія $\bar{S} = 0,132 \cdot \text{Дж/г} \cdot \text{К}$, $N_r \approx 10^{20} \text{ см}^{-3}$, отримаємо $w \approx 10^4 \cdot T'$, де T' в $^\circ \text{К}$, w в см/с . Підставляючи ці дані в (5.51), і вважаючи що поляризація створює те поле, що вимірюють в експерименті (тобто використовуючи (5.50) поділене на $4\pi: |\vec{P}| = E/4\pi = \Delta U / 4\pi l$), отримаємо

$$\frac{\Delta U}{T'} \approx 10^{-2} \frac{2e}{k_B} \quad (5.53)$$

А для середнього дипольного моменту

$$d \approx \frac{4.8 \cdot 10^{-10} \cdot 10^{-27}}{8.6 \cdot 1.4 \cdot 10^{-16}} \cdot 1 \approx 10^{-22} \text{ cgses} . \quad (5.54)$$

що збігається з результатами експериментів [60].

5.4. Зв'язок поляризації з першим звуком

Розглянемо задачу про поширення малих коливань поблизу стану рівноваги $p = p_0 + p'$, $T = T_0 + T'$, $\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}'$, $\vec{v} = \vec{v}'$, $\vec{u} = \vec{u}'$ ($v_0 = u_0 = 0$), де величини з індексом нуль означають рівноважні значення, а з штрихом – їх зміни в звуковій хвилі. Беручи до уваги рівняння стану рідкого гелію

$$\rho = \rho(p, T, \vec{E}), \text{ ми отримуємо зв'язок } \rho' = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \vec{E}} p' + \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \vec{E}} T' + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \vec{E}} \right)_{T, p} \vec{E}' .$$

З визначення тиску $p = \mu\rho - F$ маємо $d\mu = \frac{dp}{\rho} - \frac{\vec{D}}{4\pi\rho} d\vec{E} - \frac{\vec{P}}{\rho} d\vec{w} - \sigma dT$. Виходячи з

$$\text{того, що } S = S(p, T, \vec{E}), \text{ отримаємо } dS = \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_{T, \vec{E}} dp + \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{p, \vec{E}} dT + \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{E}} \right)_{T, p} d\vec{E}' =$$

$$\frac{V}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \vec{E}} dp + \frac{C_p}{T_0} dT + \vec{p}^{(\xi)} d\vec{E}', \text{ где } V - \text{об'єм гелію, } C_p - \text{теплоємність одиниці}$$

об'єму при постійному тиску, $\vec{p}^{(\xi)} = \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{E}} \right)_{T, p}$ – піроелектрична константа. Тоді

лінеаризовані за малими збуреннями рівняння дворідинної гідродинаміки матимуть вигляд

$$\rho_s \dot{v}'_i + \rho_n \dot{u}'_i + \frac{\partial}{\partial x_i} p' = \frac{\tilde{D}_0}{4\pi} \frac{\partial E'_j}{\partial x_i}; \quad \dot{\rho}' + \text{div}(\rho_s \vec{v}' + \rho_n \vec{u}') = 0;$$

$$\dot{\sigma}\rho + \sigma_0 \dot{\rho} + \sigma_0 \rho \cdot \text{div} \vec{u}' = 0; \quad \dot{\vec{v}}' + \frac{\nabla p'}{\rho} - \sigma_0 \nabla T' - \frac{\vec{D}_0 \nabla \vec{E}'}{4\pi\rho} = 0; \quad (5.55)$$

$$\text{rot} \vec{E} = 0; \quad \text{div} \vec{D} = 0; \quad \dot{\vec{D}} = 0.$$

Після виключення $\vec{u}$ і $\vec{v}$ в (5.55), ми отримуємо наступну систему рівнянь:

$$\ddot{\rho}' = \Delta p' - \frac{\vec{D}_0}{4\pi} \Delta \vec{E}', \quad \ddot{\sigma}' = \frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma_0^2 \Delta T', \quad \text{rot} \vec{E} = 0, \quad \text{div} \vec{D} = 0, \quad \dot{\vec{D}} = 0. \quad (5.56)$$

Перейдемо в зазначених рівняннях до незалежних змінних p , T і $\vec{E}$. Будемо шукати розв'язки системи (5.56) у вигляді плоскої хвилі, що біжить. У такій

хвилі величини p' , T' і $\vec{E}'$ змінюються за законом $e^{-i\omega(t-x/u)}$ (вісь x вибираємо в напрямку поширення хвилі, ω - частота, і u - швидкість звуку). При такому законі зміни величин p' , T' і $\vec{E}'$, система рівнянь (5.56) переходить в наступну систему для фур'є-компонент цих величин $p'_{\vec{k}}$, $T'_{\vec{k}}$ і $E'_{\vec{k}j}$:

$$\begin{aligned} p'_{\vec{k}} \left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) + T'_{\vec{k}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} \right) + E'_{\vec{k}j} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T, p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) &= 0, \\ p'_{\vec{k}} \left(\frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_{T, p} \right) + T'_{\vec{k}} \left(\left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_{T, p} \right) + E'_{\vec{k}j} &= 0, \quad (5.57) \\ p'_{\vec{k}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial p} \right)_{\vec{E}, T} \right) + T'_{\vec{k}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} - \frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma^2 \right) + E'_{\vec{k}j} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial E_j} \right)_{p, T} &= 0, \end{aligned}$$

де $\left(\frac{\partial D_i}{\partial E_j} \right)_T \equiv \varepsilon_{ij} + \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T, p}$ і $\left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \equiv \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} + \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p}$.

З умови спільності цих рівнянь отримуємо наступне дисперсійне рівняння

$$\frac{\omega^4}{k^4} [1+a] - \frac{\omega^2}{k^2} \left[\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_\sigma + \frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma^2 \left(\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right)_\rho + b \right] + \left[\frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma^2 \left(\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right)_\rho \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T + c \right] = 0, \quad (5.58)$$

де

$$\begin{aligned} a &= - \frac{\partial \rho}{\partial E_j} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \left[\left(\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right)_\rho \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} + \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_\sigma \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \right], \\ b &= \left(\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right)_\rho \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \left[- \frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma^2 \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T, p} + \left(\frac{\partial \sigma}{\partial E_j} \right)_{T, p} \left[\left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} - \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E}, p} \right] \right] + \\ &\quad + \frac{D_{0j}}{4\pi} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \left[\left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_\sigma \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T - \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_\sigma \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \right], \quad (5.59) \\ c &= \left(\frac{\partial T}{\partial \sigma} \right)_\rho \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \left[\frac{D_{0j}}{4\pi} \frac{\partial D_i}{\partial \rho} \left[\frac{\rho_s}{\rho_n} \sigma^2 - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial E_j} \right)_{p, T} \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right] + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_T \left(\frac{\partial \sigma}{\partial E_j} \right)_{p, T} \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(1 + \frac{D_{0j}}{4\pi} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E}, T} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right) \right]. \end{aligned}$$

Розв'язки цього рівняння, які є квадратами фазових швидкостей термоелектромеханічних хвиль, дорівнюють:

$$\begin{aligned}\left(\frac{\omega}{k}\right)_+^2 &\approx c_1^2 \left(1 - a \left(1 + \frac{C_v}{C_p} \frac{w_2^2}{c_1^2 - w_2^2}\right) - \left(\frac{C_v}{C_p} - 1\right) \frac{w_2^2}{c_1^2 - w_2^2}\right); \\ \left(\frac{\omega}{k}\right)_-^2 &\approx w_2^2 \left(1 + \left(\frac{C_v}{C_p} - 1\right) \frac{c_1^2}{c_1^2 - w_2^2} - a \left(1 - \frac{C_v}{C_p} \frac{c_1^2}{c_1^2 - w_2^2}\right)\right),\end{aligned}\quad (5.60)$$

де $c_1^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s$, $w_2^2 = \frac{TS^2 \rho_s}{C_v \rho \rho_n}$ – квадрати швидкостей першого та другого звуків відповідно. Як видно з отриманих виразів, по суті пов'язані термоелектромеханічні хвилі є звукові хвилі в надплинному гелії з урахуванням впливу електричних полів.

Для отримання кількісних оцінок скористаємося тим, що експерименти в роботі [46] проводилися в області температур, де основну роль в термодинамічних і кінетичних властивостях Ні-II відіграє газ ротонів. Енергія ротонів визначається виразом (5.2). З аналізу експериментальних даних по тепловому збудженню ХДЗ, при яких вимірювалися температурні і електричні поля, можна визначити значення піроелектричної константи і модуляцію енергії ротонів електричним полем. Значення піроелектричної константи можна оцінити, використовуючи отримані в експериментах [46] співвідношення сигналів болометра ΔT і потенціалу електричного зміщення резонатора ΔU при одній і тій же потужності, що подається на випромінювач, індукованих хвилею другого звуку для різних температур $\Delta T / \Delta U = 2,3 \cdot 10^4 \text{ K/B}$, які пов'язані між собою співвідношенням:

$$p^{(\xi)} \approx -\frac{\varepsilon}{4\pi} \frac{\Delta E}{\Delta T} = -\frac{\varepsilon}{4\pi d} \frac{\Delta U}{\Delta T}. \quad \text{Вважаючи } \varepsilon \approx 1, \text{ а } d = 2,8 \text{ см, отримаємо}$$

$$p^{(\xi)} \approx 4 \cdot 10^{-9} \frac{C G C E_q}{\text{см}^2 \text{ K}}.$$

З огляду на, що другий член в (5.2) малий у порівнянні з Δ , ми можемо їм знехтувати і визначити модуляцію енергії ротонів електричним полем $\frac{\partial \Delta}{\partial E}$ зі співвідношення

$$\vec{p}^{(\varepsilon)} = \left(\frac{\partial S}{\partial \vec{E}} \right)_{T,p} = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\partial \vec{D}}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} = \int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{E}} \varepsilon_0 \frac{\bar{N}(\bar{N}+1)}{T_0^2 k_B} \approx \frac{\partial \Delta}{\partial \vec{E}} \frac{N_r \Delta}{T_0^2 k_B}, \quad (5.61)$$

яка дорівнює $\frac{\partial \Delta}{\partial E} \approx -0,65 \cdot 10^{-29} \text{ CGCE}_q \cdot \text{см}$ при температурі $T=1,4 \text{ К}$ ($N_r = 1,4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ - число ротонів в одиниці об'єму), а також знайти такі коефіцієнти, які фігурують в дисперсійному рівнянні при тій же температурі:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial \rho} &= 4\pi \int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \varepsilon_0 \frac{\bar{N}(\bar{N}+1)}{T_0 k_B} \approx \frac{\partial \Delta}{\partial E} \frac{\partial \Delta}{\partial \rho} \frac{4\pi \Delta}{T_0 k_B} \approx 2,7 \cdot 10^{-7} \frac{\text{CGCE}_q}{\text{г}} \cdot \text{см}, \\ D_0 &= -4\pi \int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \varepsilon_0 \bar{N} \approx 10^{-8} \frac{\text{CGCE}_q}{\text{см}^2}, \\ \frac{\partial \rho}{\partial E} &= 4\pi \frac{\partial D}{\partial \mu} = (4\pi)^2 \frac{\int d\tau_p \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \right)^2 \bar{N}(\bar{N}+1)}{\int d\tau_p \frac{\partial \varepsilon}{\partial \rho} \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \bar{N}(\bar{N}+1)} \approx (4\pi)^2 \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \frac{\partial \Delta}{\partial \rho} \approx 2,2 \cdot 10^{-13} \frac{\text{г}}{\text{см} \cdot \text{CGCE}_q}. \end{aligned} \quad (5.62)$$

Це дає можливість кількісно оцінити найбільш суттєві поправки до швидкостей першого і другого звуку, пов'язані з урахуванням електричного поля і коефіцієнта теплового розширення і привести їх чисельні значення при $T = 1,4 \text{ К}$, при яких $a \approx 4 \cdot 10^{-18}$, $C_v/C_p \approx 1 + 1,47 \cdot 10^{-3}$:

$$\left(\frac{\omega}{k} \right)_+^2 \approx c_1^2 (1 - 0,32 \cdot 10^{-5} + 4,2 \cdot 10^{-18}), \quad \left(\frac{\omega}{k} \right)_-^2 \approx w_2^2 (1 + 0,47 \cdot 10^{-3} - 3,2 \cdot 10^{-20}), \quad (5.63)$$

де другі і треті складові в дужках обумовлені урахуванням коефіцієнта теплового розширення і електричних полів відповідно.

Як буде показано нижче, зв'язок електричного поля з температурою є істотно більш сильним в хвилі другого звуку, ніж в хвилі першого звуку. З цієї причини не вдається генерувати перший звук зовнішнім змінним електричним полем на відміну від другого звуку. Розв'язки системи рівнянь (5.57) дають зв'язок між величинами, що коливаються в хвилі першого і другого звуків, а також дають можливість розглянути різні способи збудження цих хвиль. Виразимо швидкості, електричне поле, температуру через тиск в хвилі першого звуку:

$$\begin{aligned}
& p'_{\vec{k}} \left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \frac{\partial D_i}{\partial \rho} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right) + \\
& + T'_{\vec{k}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right) = 0, \\
& E'_{\vec{k}j} + p'_{\vec{k}} \left(\left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} - \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)}{\left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T} \right) \right) = 0, \\
& w'_{\vec{k}} \frac{\omega}{k} - p'_{\vec{k}} \left(\frac{1}{\rho} \left(1 - \frac{\omega^2}{k^2 \sigma} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \rho} \right)_T \right) + \left(\sigma + \frac{\omega^2}{k^2 S} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \right) \frac{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)}{\left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T} \right) + \right. \\
& \left. + \left(\frac{D_{0j}}{4\pi} + \frac{\omega^2}{k^2 S} \left(\frac{\partial S}{\partial E_j} \right)_{p,T} \right) \left(\left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{T,\vec{E}} - \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{T,\vec{E}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)}{\left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T} \right) \right) = 0
\end{aligned} \tag{5.64}$$

Виразимо швидкості, електричне поле, тиск через температуру в хвилі другого звуку.

$$\begin{aligned}
p'_{\vec{k}} &= \frac{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T - \frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} \right)}{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)} T'_{\vec{k}} \\
E'_{\vec{k}j} &= \left(\frac{\left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{\vec{E},p} - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right)}{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{\vec{E},T} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)} - \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right) T'_{\vec{k}}, \tag{5.65}
\end{aligned}$$

$$w'_k = \left(\frac{D_{0j}}{4\pi\rho} + \frac{\omega^2}{k^2 S} \left(\frac{\partial S}{\partial E_j} \right)_{p,T} \right) \left(\left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T - \frac{\left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \frac{\partial D_i}{\partial \rho} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p - \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \left(\frac{\partial D_i}{\partial T} \right)_{\vec{E}} \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \right)}{\left(\left(\frac{\omega^2}{k^2 c_1^2} \frac{C_p}{C_v} - 1 \right) - \left(\frac{\partial E_j}{\partial D_i} \right)_T \frac{1}{c_1^2} \frac{C_p}{C_v} \left(\frac{\partial D_i}{\partial \rho} \right)_{T,\vec{E}} \left(\frac{\omega^2}{k^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial E_j} \right)_{T,p} + \frac{D_{0j}}{4\pi} \right) \right)} \right) T'_k$$

У рівняннях (5.64), (5.65) в коефіцієнтах перед p' , T' , w' і $\vec{E}'$, основну роль грають доданки, що не містять електричних полів. Зробивши безрозмірними змінні p' , T' , w' і $\vec{E}'$, ми отримуємо наступні співвідношення для першого і другого звуків відповідно

$$\frac{T'}{T_0} \approx -0,3 \cdot 10^{-3} \frac{p'}{p_0}, \quad \frac{E'}{E_0} \approx -0,35 \cdot 10^{-2} \frac{p'}{p_0}, \quad \frac{w'}{c_1} \approx -0,2 \cdot 10^{-3} \frac{p'}{p_0}; \quad (5.66)$$

$$\frac{p'}{p_0} \approx 1,5 \cdot 10^{-3} \frac{T'}{T_0}, \quad \frac{E'}{E_0} \approx -7 \frac{T'}{T_0}, \quad \frac{w'}{w_2} \approx 6 \frac{T'}{T_0}. \quad (5.67)$$

З цих співвідношень видно, що в хвилях першого і другого звуків температура і тиск пов'язані слабо, що пояснюється малістю коефіцієнта теплового розширення. З цієї ж причини, а також через малість коефіцієнта $\frac{\partial \rho}{\partial E_j}$, лінійно пов'язаного з піроелектричного константою, незначним є зв'язок тиску з відносною швидкістю і електричним полем в хвилі першого звуку і сильним буде зв'язок температури з електричним полем і відносною швидкістю в хвилі другого звуку.

Висновки до розділу 5

Експерименти [46] про збудження другого звуку електричним полем в He-II проводилися при температурах $1,4 \div 1,8$ К. У цій області температур газ ротонів грає основну роль в термодинамічних і кінетичних властивостях надплинного гелію. За рахунок швидких процесів ротон-ротонної взаємодії встановлюється гідродинамічний режим, який описується рівняннями дворідинної гідродинаміки. Зробивши єдине припущення про існування дипольного моменту ротонів, ми можемо теоретично пояснити результати

експериментів і визначити величину поляризації, обумовлену відносним рухом нормальної і надплинної складових гелію.

Аналіз розв'язків системи лінійних рівнянь (5.57) показує, що, як у хвилі першого, так і другого звуку коливання зазнають такі величини: температура, тиск (густина), швидкості, електричне поле, фур'є-компоненти яких пов'язані між собою. В силу малості зв'язку електричного поля з полем тиску (див. (5.66)) можна пояснити те, що в експериментах з порушення першого звуку [46] була відсутня електрична компонента, і збудження першого звуку електричним полем виявляється неефективним. В хвилі другого звуку температурне і електричне поле сильно пов'язані між собою, тому при тепловому збудженні хвиль другого звуку спостерігається електричне поле, і стає зрозумілою можливість резонансного збудження хвиль другого звуку електричним полем.

Зокрема, в даному розділі

1. знайдено систему рівнянь дворідинної гідродинаміки надплинного гелію з урахуванням зовнішнього електричного поля.
2. доведено, що при русі надплинної складової ⁴He стосовно системи квазічастинок надплинного гелію виникає електричне поле, обумовлене електричними властивостями квазічастинок гелію – ротонами.
3. знайдено залежності різниці потенціалів від температури і відносної швидкості руху нормальної і надплинної складових гелію. Виконані числові розрахунки коефіцієнтів, які задають зв'язок між різними величинами, що коливаються в хвилі першого і другого звуків за температури 1,4 К..

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі надається узагальнення квазічастинкової моделі опису квантових конденсованих середовищ на випадок сильної взаємодії квазічастинок між собою і слабкої із зовнішнім полем. Це дає змогу з єдиної точки зору пояснити екзотичні прояви електричної активності надплинного гелію та нелінійні властивості кристалів.

У ході виконання роботи були уперше здобуті такі фізичні результати:

1. Розширено модель опису нелінійних пружних властивостей твердого тіла як ізотропного середовища, яка враховує трьох- та чотирьохчастинкові взаємодії фононів.
2. Розроблено техніку розрахунку модулів пружності четвертого рангу ізотропного середовища еквівалентного до реальних кристалів з симетрією довільної кристалічної системи. Здобуто модулі пружності четвертого рангу для багатьох речовин з кубічною кристалічною ґраткою.
3. Розраховано параметр анізотропії кристалічної ґратки, який характеризує взаємодію фононів між собою, для різних речовин кубічної кристалічної системи.
4. Розраховано відхилення ізохоричної теплоємності алмаза, германію, хлориду натрія за високих температур від закону Дюлонга-Пті.
5. Уперше розраховано області існування хвиль другого звуку в кристалах алмазу та фториду літія в залежності від температури, концентрації ізотопів та розміру кристала.
6. Побудовано замкнену систему рівнянь дворідинної гідродинаміки надплинного гелію у випадку зачеплення однієї з компонент із зовнішнім електричним полем. Доведено, що при відносному русі складових гелію виникає електрична поляризація рідини.
7. Обчислено вектор поляризації надплинного гелію, обумовлений тепловими хвилями. Знайдений середній дипольний момент ротона узгоджуються з експериментальними даними.

Таким чином, усі поставлені задачі виконані, і мета дисертаційної роботи досягнута. Одержані результати верифікують основні положення квазічастинкової моделі опису властивостей конденсованих середовищ та розширюють границі застосування на випадок сильної взаємодії квазічастинок.

Температурне вікно існування хвиль другого звуку – це область гідродинамічного режиму перенесення тепла, який є набагато ефективнішим за звичайний дифузний. Для алмаза і графіта гідродинамічний режим реалізується вже при азотних температурах (за рахунок найбільшої серед всіх речовин температурі Дебая). Це дає змогу технічно спростити системи відведення тепла, наприклад, від процесорів або електромагнітів великої потужності.

Визначенні в роботі співвідношення концентрації ізотопів в кристалі та температури, за яких є можливим розповсюдження температурних хвиль, надають додаткові фізичні методи виміру ізотопічного складу речовини.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ходусов В.Д., Наумовец А.С. Уравнения двухжидкостной гидродинамики сверхтекучего гелия с учетом электрического поля. *Вісник ХНУ. Сер. фізична «Ядра, частинки, поля»*. 2010. № 899, вип.2. С.44–49.
2. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Second sound waves in diamond. *Diamond and Related Materials*. 2012. Vol. 21. P. 92 – 98.
3. Naumovets A.S., Khodusov V.D. The absorption of the variable electric field in superfluid helium by the Akhiezer mechanism. *Problems of atomic science and technology*. 2012. Series: Nuclear Physics Investigation. Vol. 57, № 1. P. 296–298.
4. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the effect of superfluid flows on the interaction of microwaves with He II. *Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 15, №4. P. 43601
5. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About conditions of existence of second sound waves in isotropically enriched crystals ^7LiF . *East European Journal of Physics*. 2015. Vol. 2, № 2. P. 59 – 64.
6. Burlayenko O., Khodusov V., Naumovets A. Reduced isotropic crystal model with respect to the fourth-order elastic moduli. *East European Journal of Physics*. 2018. Vol.5, № 1. P. 70 – 73.
7. Naumovets A.S., Poluektov Yu.M., Khodusov V.D. Nonlinear Effects in the Phonon System of Diamond Crystal. *East European Journal of Physics*. 2020. № 2. P. 124 – 135.
8. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Interaction of electromagnetic waves with superfluid helium. *International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2010: Book of abstracts* (Kyiv, Ukraine, May 21-24, 2010). Kyiv, 2010. P. 327.
9. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Features of interaction of microwaves with He-II. *International Symposium on Quantum Fluids and Solids 2010: Book of abstracts* (Grenoble, France, August 1-7, 2010). Grenoble, 2010. P. 32.

10. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About absorption of low-frequency electromagnetic waves in superfluid helium. *3rd International Conference Quantum Electrodynamics and Statistical Physics: Book of abstracts* (Kharkov, Ukraine, August 29 - September 2, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.
11. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About influence of the superfluid flows on interaction of SHF waves with He. *4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications: Book of abstracts* (Lviv, Ukraine, July 3-6, 2012). Lviv, 2012. P. 120.
12. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the possibility of excitation of microwaves by a heat flows in the superfluid helium. *6-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2014: Book of abstracts* (Kyiv, Ukraine, May 23-27, 2014). Kyiv, 2014. P. 158.
13. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Microwaves radiation by roton streams in superfluid helium. *International Conference on Quantum Fluids and Solids 2016: Book of abstracts* (Prague, Czech Republic, August 10-16, 2016). Prague, 2016. P. 96.
14. Наумовець А.С., Полукетов Ю.М., Ходусов В.Д. Nonlinear effects in the phonon system of diamond crystal. *XIV Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах»: Збірка тез* (Харків, Україна, 3-5 грудня, 2019). Харків, 2019. С.58.
15. Ландау Л.Д. Теория сверхтекучести гелия II. *ЖЭТФ*. 1941. Т.11, № 5. С. 592 – 614.
16. Халатников И.М. Теория сверхтекучести. М.: Наука, 1971. 320 с.
17. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Гиршфельдер С.В. Спиновые волны. М.: Наука, 1967. 364 с.
18. Гуревич В.Л. Кинетика фононных систем. М.: Наука, 1980. 400 с.
19. Ахиезер А.И., Алексин В.Ф., Ходусов В.Д. Газодинамика квазичастиц. I. Общая теория. *ФНТ*. 1994. Т. 20, № 12. С. 1199 – 1238.

20. Ахиезер А.И., Алексин В.Ф., Ходусов В.Д. Газодинамика квазичастиц. II. Кинетические коэффициенты в уравнениях переноса квазичастиц. *ФНТ* 1995. Т. 21, № 1. С. 3 – 23.
21. Пешков В.П. Второй звук в гелии II. *ДАН СССР*. 1944. № 45. С. 385 – 389.
22. Peshkov V.P. Determination of the velocity of propagation of the second sound in helium II. *Report of an international on fundamental particles and low temperature* (Cambridge, United Kingdom, July 22-27, 1946) Cavendish Laboratory, Cambridge. 1946. P. 19.
23. Ward J.C., Wilks J. The velocity of second sound in liquid helium near the absolute zero. *Philos. Mag.* 1951. V. 42 P. 314 – 316.
24. Ward J.C., Wilks J. Second Sound and thermomechanical effect at very low temperatures. *Philos. Mag.* 1952. V. 43. P. 48 – 50.
25. Dingle R.V. The velocity of second sound in various media. *Proc. Phys. Soc.* 1952. V. 65, № 396. P. 1044 – 1050.
26. London F. Superfluids, New York. John Wiley, 1954. 191 p.
27. Sussmann I.A., Thellung A. Thermal conductivity of perfect dielectric crystal in the absence of umklapp processes. *Proc. Phys. Soc.* 1963. V. 81. P. 1122.
28. Prohofsky E.W., Krumhansl I.A. Second-Sound Propagation in Dielectric Solids. *Phys. Rev.* 1964. V. 133. P. 1403 – 1410.
29. Guyer R.A., Krumhansl I.A. Dispersion relation for Second Sound in Solids.// *Phys. Rev.* 1964. V. 133. P. A1411 – 1417.
30. Guyer R.A., Krumhansl I.A. Thermal conductivity Second and Phonon Hydrodynamic Phenomena. *Phys. Rev.* 1966. V. 148. P. A778 – 785.
31. Kwok P.C., Martin P.C. Unified Approach to Interacting Phonon Problems.// *Phys. Rev.* 1966. V. 142. P. A495 – 501.
32. Ackermann C.C., Bertman B., Fairbank H.A., Guyer R.A. Second Sound in solid Helium. *Phys. Rev. Letters.* 1966. V. 16. P. 789 – 801.
33. Ackerman C.C., Overton W.C. Second Sound in solid Helium – 3. *Phys. Rev. Letters.* 1969. V. 22. P. 764 – 778.

34. McNelly T.F., Rogers S.J., Chanin D.J., Rollefson R.J., Goubau W.M., Schmidt G.E., Krumhansl J.A., Pohl R.O. Heat pulses in NaF: Onset of second sound. *Phys. Rev. Letters*. 1970.V. 24. P. 100 – 116.
35. Jackson H.E., Walker C.T. Thermal Conductivity, Second Sound and Phonon-Phonon Interaction in NaF. *Phys. Rev. B*. 1971. V. 3, № 4. P. 1428 – 1439.
36. Narayanamurti V., Dunes R.C. Observation of second sound in Bismuth. *Phys. Rev. Lett.* 1972. V. 28, № 22. P. 1461 – 1465.
37. Данилейченко Б.А., Порошин В.Н., Сарбей О.Г. Наблюдение второго звука в сапфире. *Письма в ЖЭТФ*. 1970. Т. 30., вып. 4. С. 215 – 218.
38. Ахиезер А.И. О поглощении звука в твердых телах. *ЖЭТФ*. 1938. Т. 8, № 12. С. 1318 – 1329.
39. Einstein A. Plank's Theory of Radiation and the Theory of specific Heat. *Ann. Phys.* 1907. V. 22. P.180-190.
40. Debye P. On the theory of specific heats. *Ann. Phys.* 1912. V. 39. P. 789.
41. Born M. and von Karman Th. About vibrations in the space lattice. *Physikalische Zeitschrift*. 1912. V. 13. P. 297.
42. Полуектов Ю.М. Самосогласованное описание системы взаимодействующих фононов. *Физика низких температур*. 2015. т. 41, № 11. С. 1181–1190.
43. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972. 280 с.
44. Poluektov Yu.M. On the quantum-field description of many-particle Fermi systems with spontaneously broken symmetry. *Ukr. J. Phys.* 2005. V. 50. No.11. P. 1237.
45. Rybalko A.S. Observation of the electric induction due to a second-sound wave in He II. *Low Temp. Phys.* 2004. V. 30. P. 994.
46. Rybalko A.S. and Rubets S.P. Observation of mechanoelectric effect in He II. *Low Temp. Phys.* 2005. V. 31. P. 623.
47. Berthold J.E., Biso D.J. and Reppy J.D. Superfluid Transition of ^4He Films Adsorbed on Porous Vycor Glass. *Phys.Rev. Lett.* 1977. V. 39. P. 348.

48. Kosevich A.M. Dynamic electrostriction of a Bose condensate and of a system of neutral atoms. *Low Temp. Phys.* 2005. V. 31. P.839.
49. Melnikovsky L.A. Polarization of dielectrics by acceleration. *arXiv e-prints*. 2006. 0505102.
50. Нацик В.Д. Электрическая активность вихрей в сверхтекучем ^4He . *ФНТ*. 2005. Т. 31, С. 1201.
51. Tolman R.G., Stewart T.D. The Electromotive Force Produced by the Acceleration of Metals. *Phys. Rev.* 1916. V. 8. P.97.
52. Buckingham M.J., Fairbank W.M. The Nature of the λ -Transition in Liquid Helium. *Progr. Low Temp. Phys.* 1961. V. 3, P.80.
53. Ессельсон Б.Н. Растворы квантовых жидкостей ^3He – ^4He . М.: Наука, 1973. 423 с.
54. Пашицкий Э.А., Рябченко С.М. О причине электрической активности сверхтекучего гелия при возбуждении в нем волн второго звука и колебаний скорости нормальной компоненты. *Физика Низких Температур*. 2007. Т. 33. С. 12-21.
55. Rybalko A., Rudavskii E., Rubets S. Electric Induction in He II. *J. Low Temp. Phys.* 2007. V. 148. P. 527.
56. Rybalko A., Rubets S., Rudavskii E. Resonance absorption of microwaves in He II: Evidence for roton emission. *Phys. Rev. B*. 2007. V. 76. P. 140503.
57. Рыбалко А.С., Рубец С.П., Рудавский Э.Я. Резонансное возбуждение единичных ротонов в He II электромагнитной волной. Контур спектральной линии. *ФНТ*. 2009. Т. 35. С. 1073-1080.
58. Henshaw D.G., Woods A.D.B. Modes of Atomic Motions in Liquid Helium by Inelastic Scattering of Neutrons. *Phys. Rev.* 1961. V. 121. P. 1266.
59. Zsigmond G., Mezei F., Telling M.T.F. High-resolution roton spectra around the superfluid transition temperature in liquid ^4He . *Physica B: Condensed Matter*. 2007. V. 388. P. 43.

60. Rybalko A.S., Rubets S.P., Rudavskii E.Y. et al. The influence of the stationary electric field upon the resonance absorption of microwaves in HeII. *arXiv e-prints*. 2008. 0807.4810.
61. Рыбалко А.С., Рубец С.П., Рудавский Э.Я. Взаимодействие электромагнитных волн сверхвысокой частоты со сверхтекучим потоком в He II. *ФНТ*. 2008. V. 34. P. 326.
62. Капица П.Л. Исследование механизма теплопередачи в гелии-II. *ЖЭТФ*. 1941. Т. 11. С.1.
63. Mineev V.P. Roton dipole moment. *JETP Letters*. 2009. V. 90. P. 866-868.
64. Loktev V.M., Tomchenko M.D. Electromagnetic and Phonon Modes for Superfluid He4 with a Disk Resonator. *Ukrainian Journal of Physics*. 2010. V. 55. P. 901-910.
65. Loktev V.M., Tomchenko M.D. Theory of a supernarrow roton absorption line in the spectrum of a disk-shaped microwave resonator. *Phys. Rev. B* 2010. V. 82. P. 172501.
66. Loktev V.M., Tomchenko M.D. On the Nature of a Narrow Roton Absorption Line in the Spectrum of a Disk-shaped SHF Resonator. *Ukrainian Journal of Physics*. 2011. V. 56. P. 49.
67. Galli D.E., Cecchetti E., Reatto L. Rotons and Roton Wave Packets in Superfluid ^4He . *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 5401.
68. Пашицкий Э.А., Пентегов В.И. О механизме поглощения электромагнитных волн сверхвысокочастотного диапазона в сверхтекучем гелии. *ЖЭТФ*. 2012. Т. 142. С. 305.
69. Melnikovsky L.A. Polarization of Dielectrics by Acceleration. *J. Low Temp. Phys.* 2007. V. 148. P. 559.
70. Паттерман С. Гидродинамика сверхтекучей жидкости. М.: Мир, 1978.
71. Madelung O. Introduction to Solid-State Theory. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag. 1978. 283с.
72. Ландау Л.Д., Лифшиц И.М. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 244с.
73. Fedorov F.I. Theory of Elastic Waves in Crystals. New York: Plenum Press.

1968. 375 p.

74. Алексин В.Ф., Беяев Н.Р., Ходусов В.Д. Модель приведенного изотропного кристалла относительно модулей упругости. *Вісник Харківського університету, серія фізична “Ядра, частинки, поля”*. 1999. № 438, вып. 1/5/. С. 39 – 42.
75. Беяев Н.Р., Ходусов В.Д. Газодинамическая теория бозе-квазичастиц. Учебное пособие. Харьков. ХНУ, 2003. 94 с.
76. Krishnamurty T.S.G. Fourth-order elastic coefficients in crystals. *Acta Cryst.* 1963. Vol. 16. P. 839.
77. Krishnamurty T.S.G. and Gopalakrishnamurty P. Elastic coefficients in crystals. *Acta Cryst.* 1968. Vol. 24. P. 563.
78. Destradea M., Ogdenb R. On the third- and fourth-order constants of incompressible isotropic elasticity. *The Journal of the Acoustical Society of America*. 2010. Vol. 128.– P. 3334.
79. Garg V.K., Puri D. S., Verma M.P. Many-Body Effects on the Fourth-Order Elastic Constants of Ionic Solids. *Phys. stat. sol. (b)*. 1977. Vol. 82. P. 481
80. Goyal S.C. and Sharma A.K. Fourth-Order Elastic Constants of Fluorite Structure Solids. *Phys. stat. sol. (b)*. 1988. Vol. 146. P. 435.
81. Poluektov Yu.M. Self-consistent field model for spatially inhomogeneous Bose systems. *Low Temperature Physics*. 2002. Vol. 28, No.6. P. 429-441.
82. Poluektov Yu.M. On the quantum-field description of many-particle Bose systems with spontaneously broken symmetry. *Ukr. J. Phys.* 2007. V. 52, No.6. P. 579.
83. Poluektov Yu.M. Modified perturbation theory of an anharmonic oscillator. *Russian physics journal*. 2004. Vol. 47, No.6. P. 656-663.
84. Poluektov Yu.M. On perturbation theory for an asymmetric anharmonic oscillator. *Russian physics journal*. 2009. Vol. 52, No.1. P. 33-45.
85. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966. 416 с.
86. Poluektov Y.M. Self-consistent description of interacting phonons in a crystal lattice. *East European Journal of Physics*. 2016. V.3, №3. P. 35-46.

87. Рейсленд Дж. Физика фононов. М.: Мир, 1975. 365 с.
88. Gerlich D. Fourth order elastic moduli of diamond structure materials. *Journal of Applied Physics*. 1995. V. 77. P. 4373.
89. Telichko A.V., Erohin S.V., Kvashnin G.M., Sorokin P.B., Sorokin B.P., Blank V.D. Diamond's third-order elastic constants: ab initio calculations and experimental investigation. *J.Mater Sci*. 2017. V. 52. P. 3447.
90. Shanker J., Singh J.P. Third- and fourth-order elastic constants for silver halides, alkaline earth oxides, and chalcogenides of Pb and Sn. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1982. Vol.70, Issue2. P. 677-681.
91. Shanker J., Bhende W.K. Higher-Order Elastic Constants and Thermoelastic Properties of Ionic Solids. *Phys. Stat. Sol. (b)*. 1986. Vol.136, Issue1. P.11-30.
92. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть I. М.: Наука. 1976. 584 с.
93. Reeber R.R. & Wang, K. Thermal expansion, molar volume and specific heat of diamond from 0 to 3000K. *Journal of Electronic Materials*. 1996. V. 25. P. 63-67.
94. Andrew C. Victor. Heat Capacity of Diamond at High Temperatures. *The Journal of Chemical Physics*. 1962. V. 36. P.1903.
95. Wang, K. & Reeber, R.R. Thermal expansion of alkali at high pressure: NaCl as an example. *Phys. Chem. Minerals*. 1996. V. 23. P.354-360.
96. Rekhviashvili S.Sh. and Kunizhev Kh.L. Investigation of the influence of lattice anharmonicity on the heat capacities of diamond, silicon, and germanium. *High Temperature*. 2017. V. 55. P. 312–314.
97. De Haas W.J., Biermasz Th. The thermal conductivity of KBr, KCl and SiO₂ at low temperatures. *Physica*. 1937. Vol. 4, Issue 8. P. 752-756.
98. Alterovitz S., Deutscher G. and Gershenson M. Heat capacity and thermal conductivity of sintered Al₂O₃ at low temperatures by the heat pulse technique. *Journal of Applied Physics*. 1975. V. 46. P. 3637.
99. Cahill D.G. Lattice Vibrations and Heat Transport in Crystals and Glasses. *Annual Review of Physical Chemistry*. 2003. V.39. P.93-121

100. Жернов А.П., Инюшин А.В. Кинетические коэффициенты в кристаллах с изотопическим беспорядком. *УФН*. 2002. Т. 172. С. 573-599.
101. Wei Lanhua, Kuo P.K., Thomas R.L., Antony T.R., Banholzer W.F. Thermal conductivity of isotopically modified single crystal diamond. *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. P. 3764-3767.
102. Берман Р. Теплопроводность твердых тел. Москва: "Мир".1979. 286 с.
103. Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов. М.: Наука, 1971. 330 с.
104. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1962. 350 с.
105. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 486 с.
106. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Гидродинамика. М.: Наука, 1986. 732 с.
107. Ахиезер А.И., Алексин В.Ф., Ходусов В.Д. Газодинамика магнонов. Проблемы физической кинетики и физики твердого тела: Сб. науч. тр. К.: Наукова думка. 1990. 472 с.
108. Алексин В.Ф., Беляев Н.Р., Ходусов В.Д. Коэффициенты переноса в газе фононов в кристаллических диэлектриках. Проблемы теоретической физики: Сб. науч. тр. К.: Наукова думка. 1991. 570 с.
109. Алексин В.Ф., Беляев Н.Р., Ходусов В.Д. Коэффициенты переноса в газе фононов в кристаллических диэлектриках. *ВАНТ*. 1992. Т.24, вып. 3. С. 9–13.
110. Onsager I. Reciprocal relations in irreversible process, I. *Phys. Rev.* 1931. V. 37, № 4. P. 405 – 426.
111. Onsager I. Reciprocal relations in irreversible process, II. *Phys. Rev.* 1931. V. 38, № 24. – P. 2265 – 2279.
112. Абрамович М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука. 1979. 524 с.
113. Алексин В.Ф., Ходусов В.Д. Адиабатический нагрев газа квазичастиц. *УФЖ*. 1974. Т. 19, № 4. С. 688 – 692.

114. Алексин В.Ф., Ходусов В.Д. Адиабатический нагрев газа квазичастиц сторонними полями. Проблемы теоретической физики. К.: Наукова думка. 1986. 175 с.
115. Ходусов В.Д. О вычислении кинетических коэффициентов в фононной газодинамике. *Вісник ХГУ, серія фізична, «Ядра частинки, поля»*. 1998. № 421. С. 184 – 188.
116. Гуржи Р.Н. Гидродинамические эффекты в твердых телах при низких температурах. *УФН*. 1968. Т.94. С. 689-718.
117. Nepsha V.I. Calculation of the influence of ^{13}C isotopes on the thermal conductivity of diamond in the approximation of the dominant role of normal phonon scattering processes. *Proceedings AS USSR*. 1991. V. 317. P.96
118. Kamatagi M., Sankeshwar N., Mulimani B. Thermal conductivity of GaN. *Diamond Relat. Mater.* 2007. V. 16. P. 98.
119. Callaway J. Model for Lattice Thermal Conductivity at Low Temperatures. *Phys. Rev.* 1959. Vol. 113. P. 1046.
120. Mann J.B. ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS. II. HARTREE-FOCK WAVEFUNCTIONS AND RADIAL EXPECTATION VALUES: HYDROGEN TO LAWRENCIUM. U.S.: Atomic Energy Commission. 1968. 276 p.
121. Masili M., Starace A. Static and dynamic dipole polarizability of the helium atom using wave functions involving logarithmic terms. *Phys. Rev. A*. 2003. V. 68. P. 012508.
122. Gugan D. and Michel G.W. Measurements of the polarizability and of the second and third virial coefficients of ^4He in the range 4,2-27,1 K. *Mol. Phys.* 1980. V. 39. P. 783.
123. Chase C.E., Maxwell E., Millett W.E. The dielectric constant of liquid helium. *Physica*. 1961. V. 27. P. 1129-1145.
124. Ахиезер А.И., Пелетминский С.В. Методы статистической физики. М.: Наука, 1997. 367 с.
125. Больцман Л. Лекции по теории газов. М.: Гостехиздат, 1956. 256 с.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Ходусов В.Д., Наумовец А.С. Уравнения двухжидкостной гидродинамики сверхтекучего гелия с учетом электрического поля. Вісник ХНУ. Сер. фізична «Ядра, частинки, поля». 2010. № 899, вип.2. С.44–49.
2. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Second sound waves in diamond. Diamond and Related Materials. 2012. Vol. 21. P. 92 – 98. (квартиль Q2)
3. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the effect of superfluid flows on the interaction of microwaves with He II. Condensed Matter Physics. 2012. Vol. 15, №4. P. 43601. (квартиль Q3)
4. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About conditions of existence of second sound waves in isotropically enriched crystals ^7LiF . East European Journal of Physics. 2015. Vol. 2, № 2. P. 59 – 64.
5. Burlayenko O., Khodusov V., Naumovets A. Reduced isotropic crystal model with respect to the fourth-order elastic moduli. East European Journal of Physics. 2018. Vol.5, № 1. P. 70 – 73.
6. Naumovets A.S., Poluektov Yu.M., Khodusov V.D. Nonlinear Effects in the Phonon System of Diamond Crystal. East European Journal of Physics. 2020. № 2. P. 124 – 135.

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

7. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Interaction of electromagnetic waves with superfluid helium. International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2010: Book of abstracts (Kyiv, Ukraine, May 21-24, 2010). Kyiv, 2010. P. 327.
8. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Features of interaction of microwaves with He-II. International Symposium on Quantum Fluids and Solids 2010: Book of abstracts (Grenoble, France, August 1-7, 2010). Grenoble, 2010. P. 32.

9. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About absorption of low-frequency electromagnetic waves in superfluid helium. 3rd International Conference Quantum Electrodynamics and Statistical Physics: Book of abstracts (Kharkov, Ukraine, August 29 - September 2, 2011). Kharkov, 2011. P. 147.
10. Naumovets A.S., Khodusov V.D. The absorption of the variable electric field in superfluid helium by the Akhiezer mechanism. Problems of atomic science and technology. 2012. Series: Nuclear Physics Investigation. Vol. 57, № 1. P. 296–298.
11. Khodusov V.D., Naumovets A.S. About influence of the superfluid flows on interaction of SHF waves with He. 4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications: Book of abstracts (Lviv, Ukraine, July 3-6, 2012). Lviv, 2012. P. 120.
12. Naumovets A.S. Resonant Absorption in Superfluid Helium. Young scientists conference “Problems of Theoretical Physics”: Book of abstracts (Kyiv, Ukraine. December 24-27, 2013). Kyiv, 2013. P. 23.
13. Khodusov V.D., Naumovets A.S. On the possibility of excitation of microwaves by a heat flows in the superfluid helium. 6-th International Conference "Physics of Liquid Matter: Modern Problems" PLMMP-2014: Book of abstracts (Kyiv, Ukraine, May 23-27, 2014). Kyiv, 2014. P. 158.
14. Khodusov V.D., Naumovets A.S. Microwaves radiation by roton streams in superfluid helium. International Conference on Quantum Fluids and Solids 2016: Book of abstracts (Prague, Czech Republic, August 10-16, 2016). Prague, 2016. P. 96.
15. Наумовець А.С., Полуєтков Ю.М., Ходусов В.Д. Термодинаміка взаємодіючих самоузгоджених фононів в кристалах. XIII Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах»: Збірка тез (Харків, Україна 5-8 грудня, 2017). Харків, 2017. С. 33.
16. Наумовець А.С., Полуєтков Ю.М., Ходусов В.Д. Nonlinear effects in the phonon system of diamond crystal. XIV Міжнародна наукова конференція «Фізичні явища в твердих тілах»: Збірка тез (Харків, Україна, 3-5 грудня, 2019). Харків, 2019. С.58.