

# КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ТЕПЛОМ КВАНТОВОМ ТРАНСПОРТЕ

*Е. В. Орленко*<sup>a\*</sup>, *Ф. Е. Орленко*<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Санкт-Петербургский политехнический университет им. Петра Великого  
195251, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>b</sup> *Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна  
191186, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 21 марта 2023 г.,  
после переработки 18 декабря 2023 г.  
Принята к публикации 20 декабря 2023 г.

Работа посвящена описанию переноса энергии когерентными тепловыми возбуждениями в диэлектриках, метаматериалах и наноразмерных системах. В технике вторичного квантования предложен общий формализм теплопроводности, учитывающий как модель свободных фононов при передаче тепла, так и образование когерентных шредингеровских состояний осцилляторной системы. Получен общий вид решения временной задачи с произвольными начальными условиями. Точное решение получено аналитически для теплового потока, переносимого когерентными фононами, созданными электронным волновым пакетом, продуцированным лазерным импульсом, воздействовавшим на наноматериал. Полученный точный вид решения в квадратурах создает основу для количественного описания когерентных фононов с различными начальными условиями, а также с учетом тепловых распределений, что позволяет проводить оценку тепловых свойств нанокристаллов. Показано, что при определенных соотношениях констант, характеризующих взаимодействие фононов с электронной подсистемой, в кристалле может устанавливаться незатухающий со временем тепловой поток.

DOI: 10.31857/S0044451024050031

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические и экспериментальные исследования последних лет показали, что перенос тепловой энергии в диэлектриках и метаматериалах на нано- и микроуровне часто носит квантово-механический характер когерентности. Квантовый характер переноса энергии приводит к новым физическим эффектам, таким как фононная когерентность, тепловая сверхпроводимость [1], тепловое эхо, баллистический резонанс и др.

При классическом подходе к описанию тепловых процессов, основанном на феноменологически вводимых соотношениях, определяющих коэффициенты переноса, теплопроводность в твердых телах определяется по закону Фурье. В рамках этой гипотезы обычно постулируется линейная зависимость

тепловых потоков от термодинамических параметров [2, 3]. В кинетической теории предполагается, что совокупность движущихся квазичастиц (бозе-, или ферми-типа) [4] переносит тепло. Движение квазичастиц (эволюция их функции распределения) описывается как уравнением переноса Больцмана в квазиклассическом случае, так и более строгим аппаратом температурных функций Грина. Свободное квазиклассическое движение квазичастиц соответствует баллистическому способу переноса тепла, который реализуется в гармонических кристаллах. Влияние нелинейности и дефектов решетки, межатомных взаимодействий на теплообмен моделируется взаимодействиями (столкновениями) квазичастиц, в частности, подобные эффекты возникают в системах типа планарных полупроводниковых наноструктур при взаимодействии в них оптически возбужденных экситонов с акустическими фононами [5]. В результате столкновений квазичастицы могут совершать броуновское движение или блуждание по Леви. Первое соответствует классической фурье-модели теплообмена, а второе — аномаль-

\* E-mail: eorlenko@mail.ru

ному теплообмену [6–8]. В [9] показано, что функция распределения квазичастиц является функцией Вигнера, а не Планка, как для свободных фононов. Уравнение, описывающее эволюцию функции Вигнера для гармонических кристаллов, было получено Мильке [10], а обобщение на слабо ангармонический случай сделано в [11].

Когерентный тепловой перенос, включая минимальную теплопроводность и локализацию Андерсона, интенсивно наблюдался в различных нанофононных кристаллах. Нанофононные кристаллы являются искусственными материалами, в которых волновая природа колебаний решетки проявляется явно в тепловых свойствах данных материалов [12–14]. Фононная когерентность была установлена в качестве основного источника различных уникальных явлений теплового переноса [12–14], таких как когерентный тепловой перенос и эффект удержания фононов. Недавние исследования обнаружили, что фононная когерентность оказывает значительное влияние на фонон-фононное рассеяние, фононные модальные корреляции и межфазное распространение фононов, которые отличаются от картины «чистых» частиц [15–17].

В работе [18], так же как и в [5], исследуется связь блоховских колебаний с продольными оптическими фононами, например, в узкоямной сверхрешетке  $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}/\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ , где наблюдалось сильное увеличение амплитуд когерентных фононов, когда блоховские колебания впоследствии настраиваются в резонанс с различными модами оптических фононов [18]. Большинство проявлений когерентности тепловых фононов в экспериментальных исследованиях основаны на измерении теплопроводности и ее характерных изменений [13, 14]. Например, о существовании когерентных фононов косвенно свидетельствует экспериментальное наблюдение немонотонной зависимости теплопроводности от периода сверхрешетки [15–17, 19, 20]. В работе [14] когерентность фононных возбуждений исследуется путем расчета теплопроводности  $\kappa$  на основе подхода Грина–Кубо как автокорреляционная функция теплового потока  $S(t)$ , при этом предполагается, что выражение для удельной теплоемкости на моду сводится к классическому  $C^{\text{class}}$ , если корреляционный член (автокорреляция числа фононов), учитывающий число фононов в данной моде, просто равен  $N_\lambda = T/\hbar\omega_\lambda$ , где  $T$  — температура в энергетической шкале. В случае преобладания «корпускулярно-подобного» поведения, корреляционный множитель  $\text{Cor}(t)$  следует экспоненциальному закону затухания со временем жизни  $\tau^{(p)}$

(particle), в соответствии с обычным приближением одномодового времени релаксации

$$\text{Cor}_\lambda = e^{-t/\tau^{(p)}}.$$

По мере увеличения эффекта когерентности при описании распада фононов здесь учитывается поправка, включающая модальное время когерентности  $\tau_\lambda^c$  (coherent) следующим образом:

$$\text{Cor}_\lambda = \exp\left[\frac{t}{\tau^{(p)}}\right] \exp\left[-4\ln(2)\frac{t^2}{(\tau_\lambda^c)^2}\right].$$

При этом ожидалось, что когерентность окажет решающее влияние на фононный распад и его распространение, распад фононов должен следовать обобщенному закону, как показано в [14] для коэффициента теплопроводности

$$\kappa \propto \frac{1}{3} \sum_{\alpha,\lambda} C_\lambda^{\text{class}} v_{\lambda\alpha}^2 \tau_\lambda^c \exp\left[\frac{(\tau_\lambda^c)^2}{128(\tau_\lambda^p)^2}\right].$$

Однако экспериментально полученные зависимости аккумулятивной классической и квантовой теплопроводности для  $\text{Tl}_3\text{VSe}_4$  при температурах 50 и 300 К показывают хорошее согласие между результатами вычислений методом молекулярной динамики (МД) и экспериментом для высокой температуры, когда «работает» классический предел, в то время как для температуры 50 К, когда ожидаемое в расчетах квадратичное (гауссовского типа) затухание демонстрирует существенное расхождение с экспериментом. Оценка этой обобщенной теплопроводности была реализована путем введения вейвлетного преобразования МД-величин, которое дает время когерентности фононных возбуждений, а также их время жизни.

Когерентные эффекты при переносе тепла проявляют себя также в недавно возникшем направлении — полупроводниковой оптомеханике, основанной на использовании экситонных поляритонов [21, 22]. Поляритоны являются смесью фотонов и материальных возбуждений [5]. В работе [5] теоретически исследовано взаимодействие оптически возбужденных экситонов с акустическими волнами в планарных полупроводниковых наноструктурах. Это взаимодействие приводит к сильной нелинейности в распространении звука в массивах квантовых ям, или в планарных полупроводниковых брэгговских микрорезонаторах, поддерживающих экситон-поляритонные моды.

В нашей работе мы покажем, что в кристалле с учетом взаимодействия колебаний кристалли-

ческой решетки с электронной подсистемой экситонной составляющей поляритона могут формироваться когерентные состояния, аналогичные состояниям Шредингера. Принимая во внимание константу нелинейного оптомеханического взаимодействия между оптически накачиваемыми экситонами и распространяющимися акустическими волнами, рассчитанную в работе [5], покажем, что когерентные состояния при тепловом транспорте действительно формируются в волновой пакет. В координатном представлении эти состояния являются не чем иным, как осциллятором со смещенным центром. Эти когерентные состояния с пуассоновским распределением по числу фононов в данной моде играют важную роль и приводят к характерным зависимостям тепловых потоков от времени. При определенных временах затухания фононов в полосе частот, связанной с этой константой, может формироваться не затухающий со временем тепловой поток (спектральная плотность потока в полосе частот). Такое поведение теплового потока напоминает сверхтеплопроводность, рассматриваемую в работах [22–27], для которой в литературе иногда используется термин «тепловая сверхпроводимость». Полупроводники, кубические кристаллы арсенида бора (BAs), как было недавно обнаружено [22–25], обладают сверхвысокой теплопроводностью по сравнению с большинством обычных материалов и демонстрируют большие перспективы для управления тепловым режимом в электронике [25–27].

## 2. ГАМИЛЬТониан, ОПИСЫВАЮЩИЙ КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФОНОНОВ

Как известно, упругие колебания кристаллической решетки в классическом пределе могут рассматриваться как набор плоских волн с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и соответствующей частотой

$$\nu = c|\mathbf{k}|/2\pi = \omega/2\pi$$

(где  $\omega$  — угловая частота) и поляризациями, например линейными,  $\lambda$  ( $\lambda = 0, 1, 2$ ). При квантовом описании с учетом квантования амплитуд волн  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  — это набор  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  фононов с импульсами  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$  и энергиями  $\varepsilon_k = \hbar\omega_k$  с соответствующей функцией распределения числа фононов в заданной моде  $\mathbf{k}\lambda$ :

$$n_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{e^{\hbar\omega_k/T} - 1},$$

где  $T$  — температура в энергетической шкале:

$$T = k_B T^\circ,$$

$k_B$  — постоянная Больцмана,  $T^\circ$  — температура в градусах. Соответствующие операторы рождения и уничтожения,  $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ ,  $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$ , фонона в заданном состоянии  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  определяются через операторы обобщенных координат  $\hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda}$  и импульсов  $\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}$  как

$$\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left( \hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}}{im\omega_k} \right),$$

$$\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} = \sqrt{\frac{m\omega_k}{2\hbar}} \left( \hat{Q}_{\mathbf{k}\lambda} - \frac{\hat{P}_{\mathbf{k}\lambda}}{im\omega_k} \right),$$

где  $m$  — масса иона кристаллической решетки. Соответствующие коммутационные соотношения для них,  $[\hat{b}_{\mathbf{k}'\lambda'}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\delta_{\lambda'\lambda}$ , определяются известными условиями коммутации для операторов координат и импульсов (более подробно см. в Приложении). Таким образом, оператор вектора смещения  $n$ -го иона решетки  $\hat{\xi}_n(\mathbf{r}, t)$  определяется как

$$\hat{\xi}_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \left[ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_k t} \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{i\omega_k t} \mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}) \right]. \quad (1)$$

Здесь

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} e_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

— координатная часть амплитуды гармоники (моды)  $\mathbf{k}\lambda$ ,

$$\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} e^{-i\omega_k t},$$

$$\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t) = \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger e^{i\omega_k t}.$$

Соответствующий гамильтониан, описывающий свободные колебания кристаллической решетки, имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}^0 = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \hat{\xi}_i^2 + \frac{\gamma}{2} (\hat{\xi}_i - \hat{\xi}_{i-1})^2 \right\} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_k \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right). \quad (2)$$

Здесь  $\gamma$  — «коэффициент жесткости» решетки, который определяется потенциалом взаимодействия соседних ионов:

$$\gamma = \frac{\partial^2}{\partial x^2} U(x).$$

В изотропной среде деформационный потенциал

$$W_d = -\gamma \text{Sp} \hat{\xi}$$

определяет оператор энергии взаимодействия атома (иона, или любого дефекта, имеющего электронную структуру) с акустическими фононами [28]:

$$\hat{W}_d \equiv \hat{V}_{eph} = -\gamma \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left\{ \sqrt{\frac{N}{2m\hbar\omega_k}} \times \right. \\ \left. \times (i\mathbf{e}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{k}_{i \rightarrow f}) \hat{c}_{f\sigma'}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \times \right. \\ \left. \times \left( b_{\mathbf{k}, \lambda}(t) e^{i\mathbf{k}\lambda \cdot \mathbf{r}} - b_{-\mathbf{k}, \lambda}^+(t) e^{-i\mathbf{k}\lambda \cdot \mathbf{r}} \right) \right\}, \quad (3)$$

Здесь операторы  $\hat{c}_{f\sigma'}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$  — операторы рождения и уничтожения электронов в указанных, например экситонных, состояниях  $|\eta_{i\sigma}\rangle, |\eta_{f\sigma'}\rangle$  являются операторами фермионного типа. Здесь вектор  $|\eta_{i\sigma}\rangle$  означает начальное состояние электрона в экситонном состоянии, которое включает в себя спин электрона с проекцией  $\sigma$ . С электроном, находящемся в указанном состоянии, взаимодействуют фононы, число которых в данной моде  $\mathbf{k}\lambda$  обозначено как  $n_{\mathbf{k}\lambda}^{(i)}$ . Тогда начальное состояние системы, «экситон + фонон» будет описываться как  $|i\rangle = |n_{\mathbf{k}\lambda}^{(i)} \eta_{i\sigma}\rangle$ . При взаимодействии с фононами, описываемом оператором «электрон»-фононного взаимодействия  $\hat{V}_{eph}$ , атомная система, или «электронная среда», переходит в конечное состояние  $f$  (или  $|f\rangle = |n_{\mathbf{k}\lambda}^{(f)} \eta_{f\sigma'}\rangle$ ). В этом случае набор всех квантовых чисел, характеризующих электронную систему, обозначим как  $\eta_{f\sigma'}$  с учетом их спинового состояния  $\sigma'$ , а состояние фононной системы с числом фононов в данной моде  $\mathbf{k}\lambda$  как  $n_{\mathbf{k}\lambda}^{(f)}$ .

В результате данного взаимодействия один или более фононов в определенном поляризационном состоянии и с определенными импульсами испущены или поглощены «электронной средой». Разница в импульсе и поляризации «электронной среды», инициируемая излучением или поглощением фононов, по сути, определяет поляризационные характеристики испускаемых или поглощаемых фононов. Этот процесс описывается дифференциальной вероятностью перехода,  $dw_{fi}^{(a)}$  (для абсорбции) и  $dw_{fi}^{(e)}$  (для испускания). Необходимо подчеркнуть, что вообще говоря, начальное и конечное возбужденные состояния «электронной среды» не являются стационарными. Они не только пропорциональны соответствующим осциллирующим во времени множителям,

$$|\eta_i\rangle \propto \exp(-iE_i t/\hbar), \quad |\eta_f\rangle \propto \exp(-iE_f t/\hbar),$$

но также являются релаксирующими к соответствующим основным состояниям с частотами релакса-

ции  $\gamma_i$  и  $\gamma_f$  или так называемыми вероятностями релаксации в единицу времени:

$$|\eta_i\rangle \propto \exp(-iE_i t/\hbar - \gamma_i t), \\ |\eta_f\rangle \propto \exp(-iE_f t/\hbar - \gamma_f t),$$

которые определяют ширину спектральной линии. Принимая во внимание относительную малость константы взаимодействия электронной системы с колебаниями решетки, это взаимодействие можно последовательно описывать методами теории возмущений. В соответствии с общими формулами нестационарной теории возмущений с возмущением, явно зависящим от времени, вероятность  $P_{fi}(t)$  перехода из начального состояния  $|i\rangle$  системы фононов + «электронная среда» в конечное состояние  $|f\rangle$  под действием возмущения, действующего в интервале времени  $[0, t]$ , можно представить в виде разложения по вкладам, учитывающих одно-, двух-, трех-фононные и т. д. переходы.

Для однофононного перехода, сопровождающегося эмиссией ( $e$ ), или абсорбцией ( $a$ ) одного фонона, характеризующегося набором квантовых чисел  $\pi_\rho \equiv \{\mathbf{k}, \lambda, \omega_k\}$ , вероятность этого процесса определяется тогда следующей формулой:

$$\hat{V}(t') = \hat{V}^{(e)}(\pi_p) e^{i\omega_k t'} + \hat{V}^{(a)}(\pi_p) e^{-i\omega_k t'}, \quad (4)$$

где

$$\hat{V}^{(e)}(\pi_p) = -\gamma \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(0) A_{\mathbf{k}\lambda}^*(\mathbf{r}), \\ \hat{V}^{(a)}(\pi_p) = -\gamma \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k}} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}(0) A_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

Описание процесса взаимодействия фононов и электронной системы с поляризацией, обусловленной деформационным потенциалом, проводится с учетом как вклада свободных тепловых колебаний кристалла, см. формулу (2), так и собственно вклада электрон-фононного взаимодействия:

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}^0 + \hat{V}(t') = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hbar\omega_k \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) + \right. \\ \left. + \left( -\frac{i}{\hbar} \right) \langle \eta_f | (-\gamma) e \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_k N}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \cdot i\mathbf{k} \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i \rangle \times \right. \\ \left. \times \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t') + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}(t') \right) \right\}, \quad (6)$$

Под матричными элементами  $\langle \eta_f | \hat{V}_{eph} | \eta_i \rangle$ , вычисленными по начальному и конечному состояниям

электронной системы, можно понимать также эффекты, обусловленные взаимодействием с экситонной поляризацией и подробно описанные в [5]. Здесь константу упругого взаимодействия  $\gamma$  следует заменить на константу  $\Xi$ , которая, помимо константы деформационного потенциала  $\gamma$ , приблизительно равной 10 эВ, содержит еще вклад поляризационного потенциала  $\varepsilon|P|^2$ , где  $\varepsilon = 4\pi\Xi^2/\omega\mathcal{E}$ ,  $P$  — амплитуда экситонной поляризации,  $\mathcal{E}$  — модуль Юнга. Расчет матричных элементов  $\langle \eta_f | \hat{V}_{eph} | \eta_i \rangle$  приводит к гамильтониану, описывающему колебания решетки с учетом влияния электронной системы на фононную, например, с учетом экситон-фононного взаимодействия:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hbar\omega_k \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\} \right\}, \quad (7)$$

$$\Lambda_{\mathbf{k}\lambda} = e\Xi e_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_k N}},$$

$$\Xi = \gamma \left( 1 + \frac{4\pi\gamma^2}{\omega\mathcal{E}} |P|^2 \right).$$

По своей форме описание фононной системы с помощью гамильтониана (7) совпадает с описанием оптических полей, взаимодействующих с веществом (электронной системой). Для последних показано, что наиболее приемлемым базисом является отнюдь не базис «фоковских» состояний с определенным числом фотонов в заданной моде и неопределенной фазой, а базис когерентных состояний, который в отличие от «фоковских» имеет переменное число частиц (в оптическом смысле фотонов), но при этом определенную фазу [29]. (Более подробно см. Приложение.)

### 3. КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ФОНОНОВ

Рассмотрим подробнее полученный гамильтониан (7), вернее его составляющую, отвечающую моде  $(\mathbf{k}\lambda)$ :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\}. \quad (8)$$

Для его диагонализации мы совершим унитарное преобразование — такое, которое связывает исходные (старые) операторы рождения/уничтожения частицы в осцилляторном состоянии с новыми опе-

раторами рождения и уничтожения следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger &= B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + u_{\mathbf{k}\lambda}^*, \\ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} &= B_{\mathbf{k}\lambda} + u_{\mathbf{k}\lambda}. \end{aligned} \quad (9)$$

где  $u_{\mathbf{k}\lambda}$  — некоторая в общем случае комплексная функция. Они также удовлетворяют коммутационному соотношению бозонного типа:

$$[B_{\mathbf{k}'\lambda'} B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{\lambda'\lambda}.$$

Подставляя выражение (9) в гамильтониан (8) и проводя диагонализацию, имеем

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left( B_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger B_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \frac{2(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda})^2}{\hbar\omega_k}. \quad (10)$$

Для этого необходимо, чтобы функция  $u_{\mathbf{k}\lambda}$  была чисто вещественной:

$$u_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}. \quad (11)$$

Известно, что подобное линейное преобразование операторов рождения/уничтожения (11) осуществляется оператором унитарного преобразования  $\hat{U} = e^{\hat{D}}$  (где  $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$  — эрмитов оператор):

$$B = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \hat{b} + \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}, \quad (12)$$

где индексы  $(\mathbf{k}\lambda)$  у операторов  $\hat{b}^\dagger$  и  $\hat{b}$  пока опущены. Поскольку состояния с различными  $(\mathbf{k}\lambda)$  являются независимыми, ортогональными, мы можем, не умаляя общности рассуждений, эти индексы опустить с целью избежать громоздкости записи. Ищем оператор  $\hat{D}$  в виде

$$\hat{D} = \alpha(\hat{b}^\dagger - \hat{b}),$$

с вещественной функцией

$$\alpha = \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Оператор унитарного преобразования в общем случае имеет вид

$$\hat{U}(\alpha) = e^{(\alpha\hat{b}^\dagger - \alpha\hat{b})}.$$

Он преобразует «старую» функцию вакуума  $|n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = |0\rangle$  в соответствующий «новый» вакуум:

$$\begin{aligned} |\nu_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle &= |\alpha\rangle = \hat{U}(\alpha) |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = \\ &= e^{(\alpha\hat{b}^\dagger - \alpha\hat{b})} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle. \end{aligned} \quad (13)$$

Принимая во внимание равенство Бэйкера–Кэмпбелла–Хаусдорфа, получаем

$$e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b}} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger} e^{-\alpha \hat{b}} |n_{\mathbf{k}\lambda} = 0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^\nu}{\sqrt{\nu!}} |\nu\rangle = |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (14)$$

Мы учли также, что  $\hat{b}|n=0\rangle \equiv 0$ . Полученная суперпозиция осцилляторных состояний с различным числом фононов в данной моде представляет собой когерентное состояние, аналогичное глауберовским фотонным состояниям. Понятие когерентных состояний введено Шредингером в 1926 г. Они являются собственными состояниями полученного гамильтониана (13) и соответствуют энергии, учитывающей взаимодействие с электронной подсистемой:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left( \alpha_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \frac{2(\Lambda_{\mathbf{k}\lambda})^2}{\hbar\omega_k}. \quad (15)$$

Для них справедливы следующие выражения (см. подробно [29]):

$$\begin{aligned} \hat{b} |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \alpha_{\mathbf{k}\lambda} |\alpha\rangle_{\mathbf{k}\lambda}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\lambda} &= \frac{\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}}{\hbar\omega_k}, \end{aligned} \quad (16)$$

которым отвечает собственное значение энергии (15), где среднее число фононов в когерентном состоянии, соответствующее данной моде, равно

$$\begin{aligned} \langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \langle \alpha | \hat{b}^\dagger \hat{b} | \alpha \rangle_{\mathbf{k}\lambda} = |\alpha|_{\mathbf{k}\lambda}^2, \\ | \alpha \rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= e^{-\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\sqrt{\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}^n}}{\sqrt{n!}}, \end{aligned} \quad (17)$$

а функция распределения по числу фононов в данной моде отвечает распределению Пуассона (см. Приложение)

$$W_{\mathbf{k}\lambda}(n) = e^{-\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}} \frac{\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda}^n}{n!}. \quad (18)$$

С учетом (16), (17), а также того, что сама константа взаимодействия для данной моды  $\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}$  все-таки является сложной функцией частоты (7), полученные когерентные состояния носят специфический характер и зависят от частоты распространяющейся моды колебаний. Здесь

$$\langle n \rangle_{\mathbf{k}\lambda} = |\alpha|_{\mathbf{k}\lambda}^2 \propto \frac{1}{\omega_k^3}.$$

#### 4. ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ВРЕМЕННОЙ ЗАДАЧИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ С ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМОЙ. ПОТОК ЭНЕРГИИ

Рассмотрим ситуацию, когда оптомеханическое взаимодействие между оптически накачиваемыми экситонами и распространяющимися акустическими волнами содержит явную зависимость от времени, обусловленную поляритонной генерацией экситонов при воздействии на наноструктуру лазерного импульса. Тогда

$$\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) = e\Xi(t) \mathbf{e}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{k} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega_k N}} \langle \eta_f(t) | \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i(t) \rangle. \quad (19)$$

Соответствующим образом гамильтониан такой системы переписется как

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hbar\omega_k \left( \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) \left\{ \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} \right\}.$$

Мы рассматриваем решение для каждой моды колебаний независимо. В этом случае необходимо решать нестационарное уравнение Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \quad (20)$$

Как и в [30], общий вид решения будем искать в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \\ &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger} e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} e^{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t) \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty), \end{aligned} \quad (21)$$

где  $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty)$  — волновой вектор системы в начальном состоянии до воздействия на нее электронного возмущения,  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$ ,  $\gamma(t)$  — искомые функции времени. Подставляя (21) в (20) и принимая во внимание следующие коммутационные соотношения [30]:

$$\begin{aligned} [e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger] &= \beta_{\mathbf{k}\lambda} e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = (\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \beta_{\mathbf{k}\lambda}) e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}}, \\ [e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}] &= -\alpha_{\mathbf{k}\lambda} e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \Rightarrow \\ &\Rightarrow e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} = (\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}) e^{\alpha_{\mathbf{k}\lambda} \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger}, \end{aligned} \quad (22)$$

приходим к уравнению (для каждой моды  $\mathbf{k}, \lambda$ )

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \frac{\dot{C}(t)}{C(t)} + \dot{\alpha}(t) \hat{b}^\dagger + \dot{\beta}(t) (\hat{b} - \alpha(t)) + \right. \\ \left. + (\hat{b}^\dagger + \beta) (\hat{b} - \alpha(t)) \dot{\gamma}(t) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \\ = \left\{ \hbar\omega_k (\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2}) - \Lambda(t) (\hat{b}^\dagger + \hat{b}) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \end{aligned} \quad (23)$$

Компонуя коэффициенты при комбинациях операторов рождения/уничтожения в данной моде, получаем

$$\begin{aligned} & i\hbar \left\{ \left( \frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t)\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right) + \right. \\ & \quad \left. + (\dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t))\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \right. \\ & \quad \left. + (\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t))\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \\ & = \left\{ \hbar\omega_{\mathbf{k}}(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2}) - \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)(\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + \hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}) \right\} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t). \end{aligned} \quad (24)$$

Приравнивая коэффициенты при соответствующих комбинациях операторов рождения/уничтожения в данной моде слева и справа, приходим к системе уравнений для определения искомым функций  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$ ,  $\gamma(t)$ , которая является общей для различных начальных условий:

1) для коэффициентов, стоящих при операторе  $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$ , имеем уравнение

$$i\hbar\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \hbar\omega_{\mathbf{k}};$$

2) для коэффициентов, стоящих при операторе  $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}$ , имеем уравнение

$$i\hbar(\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t)) = -\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t);$$

3) для коэффициентов, стоящих при операторе  $\hat{b}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ , имеем уравнение

$$i\hbar(\dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t)) = -\Lambda_{\mathbf{k}\lambda};$$

4) для свободных членов имеем уравнение

$$i\hbar \left( \frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t)\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)\dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) \right) = \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2}.$$

Таким образом, приходим к системе уравнений, определяющей в общем виде решение временной задачи:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= -i\omega_{\mathbf{k}}, \\ \dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - i\omega_{\mathbf{k}}\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{i\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\hbar}, \\ \dot{\alpha}_{\mathbf{k}\lambda}(t) + i\omega_{\mathbf{k}}\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{i\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{\hbar}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\frac{\dot{C}_{\mathbf{k}\lambda}(t)}{C_{\mathbf{k}\lambda}(t)} - \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)(\dot{\beta}_{\mathbf{k}\lambda}(t) - \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)i\omega_{\mathbf{k}}) = -\frac{i}{2}\omega_{\mathbf{k}}.$$

Отсюда получаем общий вид решений для искомым коэффициентов, полностью определяющих волновую функцию (волновой вектор) в любой момент времени:

$$\begin{aligned} C_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\right) \exp\left\{-\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \times \right. \\ & \quad \left. \times \left( \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{-i\omega t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \left( \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t'')e^{i\omega t''} \right) \right)\right\}, \\ \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{ie^{-i\omega_{\mathbf{k}}t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{i\omega_{\mathbf{k}}t'} dt', \\ \beta_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= \frac{ie^{i\omega_{\mathbf{k}}t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t')e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t'} dt', \\ \gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= -i\omega_{\mathbf{k}}t. \end{aligned} \quad (26)$$

Далее мы рассматриваем возможное решение задачи, которая соответствует экспериментам типа [18], когда когерентная суперпозиция электронных состояний получается в результате воздействия на электронную систему ультракоротких лазерных импульсов. До воздействия поля лазера система изначально находилась в вакуумном состоянии по всем модам  $\Psi_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) = |0\rangle_{\mathbf{k}\lambda}$ . Начальные условия можно взять в виде

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 0, \\ \beta_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 0, \\ C_{\mathbf{k}\lambda}(-\infty) &= 1. \end{aligned} \quad (27)$$

Рассмотрим для примера эволюцию фононного «волнового пакета», появление которого обусловлено взаимодействием с электронным волновым пакетом, генерированным экситонной компонентой поляритона, и описываемого матричным элементом в (19)  $\langle \eta_f(t) | \hat{c}_f^\dagger \hat{c}_i | \eta_i(t) \rangle$ , что является временным сигналом  $\Lambda(t)$  «электрон-фононного взаимодействия» в виде функции

$$\Lambda_{\mathbf{k}\lambda}(t) = \Lambda_{\mathbf{k}\lambda_0} e^{-\frac{|t|}{\tau}}, \quad (28)$$

Тогда, используя полученные общие выражения (28) для коэффициентов  $C_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ ,  $\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ ,  $\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ ,  $\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ , по-

лучаем явные зависимости от времени:

$$\begin{aligned} \alpha_\omega(t) &= \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \int_{-\infty}^t \Lambda_0 e^{-|t'|/\tau} e^{i\omega t'} dt'' = \\ &= \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \left\{ \frac{2\tau}{1+(\tau\omega)^2} - \frac{\tau e^{-t/\tau} e^{i\omega t}}{1-i\tau\omega} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{ie^{-i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \frac{2\tau}{1+(\tau\omega)^2}, \\ \beta_\omega(t) &= \frac{ie^{i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \int_{-\infty}^t e^{-|t'|/\tau} e^{-i\omega t'} dt' = \\ &= \frac{ie^{i\omega t}}{\hbar} \Lambda_0 \frac{2\tau}{1+(\omega\tau)^2}, \quad \gamma(t) = -i\omega t, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} C_\omega(t) &= e^{-i\omega t/2} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^t dt' \times \right. \\ &\times \left. \left( \Lambda_0 e^{-|t'|/\tau} e^{-i\omega t'} \int_{-\infty}^{t'} dt'' \left( \Lambda_0 e^{-|t''|/\tau} e^{i\omega t''} \right) \right) \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} e^{-i\omega t/2} \exp \left\{ -\frac{\Lambda_0^2}{2\hbar^2} \left[ \frac{2/\tau}{(1/\tau)^2 + \omega^2} \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (30)$$

Принимая во внимание начальные условия (27), (28), можно записать волновую функцию в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) e^{\alpha(t)b^\dagger} e^{\beta(t)b} e^{\gamma(t)b^\dagger b} |0\rangle = \\ &= C_{\mathbf{k}\lambda}(t) \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\nu!} b_{\mathbf{k}\lambda}^{\dagger \nu} |0\rangle = C_{\mathbf{k}\lambda}(t) \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\alpha_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\sqrt{\nu!}} |\nu\rangle, \\ e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}} e^{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}} |0\rangle &= \\ &= e^{\beta(t)b} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\gamma_{\mathbf{k}\lambda}^\nu(t)}{\nu!} \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}^\nu |0\rangle = e^{\beta_{\mathbf{k}\lambda}(t)b_{\mathbf{k}\lambda}} \cdot \hat{1} |0\rangle = |0\rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

Легко показать при этом, что условие нормировки волнового вектора при полученных значениях коэффициентов (29), (30) полностью удовлетворяется:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) | \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) \rangle &= |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2\nu}}{\nu!} = \\ &= |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 e^{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2} = 1, \\ |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 &= e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2}, \Rightarrow |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)| = e^{-|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2/2} = \\ &= \exp \left\{ -\frac{\Lambda_0^2}{2\hbar^2} \left[ \frac{2\tau}{1+(\omega_{\mathbf{k}}\tau)^2} \right]^2 \right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 &= \left( 2\frac{\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^2} - \right. \\ &- \frac{e^{-t/\tau}}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^{3/2}} \cos(\omega_{\mathbf{k}}t + \arctg(\omega_{\mathbf{k}}\tau)) + \\ &\left. + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \left( \frac{2\tau\Lambda_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega_{\mathbf{k}})^2)^2}. \end{aligned} \quad (33)$$

Тогда тепловой поток энергии, переносимой фононами в когерентных состояниях определяется как

$$\begin{aligned} \langle j \rangle_{\mathbf{k}\lambda} &= \hbar\omega_{\mathbf{k}} c_s \langle \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) | \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} | \Psi_{\mathbf{k}\lambda}(t) \rangle = \\ &= \hbar\omega_{\mathbf{k}} c_s |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 \sum_{\nu=0}^{\infty} \nu \frac{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^{2\nu}}{\nu!} = \\ &= \hbar\omega_{\mathbf{k}} c_s |\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 |C_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2 e^{|\alpha_{\mathbf{k}\lambda}(t)|^2}, \end{aligned} \quad (34)$$

где  $c_s$  — скорость звука в кристалле (фазовая скорость для данной моды):

$$c_s = \frac{\omega_{\mathbf{k}}}{k}.$$

С учетом условия нормировки (32) спектральная плотность потока тепловой энергии будет равна

$$\begin{aligned} \langle j \rangle_\omega &= \frac{d\varepsilon}{d\omega} = \hbar\omega c_s \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} |\alpha_\omega(t)|^2 = \\ &= \hbar\omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left( \frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} - \right. \\ &\frac{e^{-t/\tau} \cos(\omega t + \arctg(\omega\tau))}{(1+(\tau\omega)^2)^{3/2}} + \left. \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar\omega^3}{c_s^2} \left( \frac{2\tau\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2}. \end{aligned} \quad (35)$$

Для промежутка времени  $T = 2\pi/\omega \ll t < \tau$  плотность потока будет иметь вид

$$\begin{aligned} \langle j \rangle_\omega &= \hbar\omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left( \frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Для промежутка  $\tau < t \rightarrow \infty$  имеем

$$\langle j \rangle_\omega = \frac{d\varepsilon}{d\omega} = \hbar\omega \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^2} \frac{2\pi}{3} |\alpha_\omega(t)|^2 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar\omega^3}{c_s^2} \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2}. \quad (37)$$

Тогда полный квантово-механический поток энергии, переносимый когерентными фононами, без учета теплового фактора определяется как интеграл

$$\begin{aligned} J &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle j \rangle_\omega d\omega = \int_{-\varpi_D}^{\varpi_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^2} \hbar\omega^2 d\omega = \\ &= \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{2\hbar}{c_s^2} \left\{ \int_0^{\varpi_D} \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d\omega + \right. \\ &\quad \left. + \frac{e^{-2t/\tau}}{4} \int_0^{\varpi_D} \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)} d\omega \right\} = \\ &= \left( \frac{\Lambda_0}{\tau\pi} \right)^2 \frac{2}{\hbar c_s^2} \left\{ \left( 1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(1 + (\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}, \quad (38) \end{aligned}$$

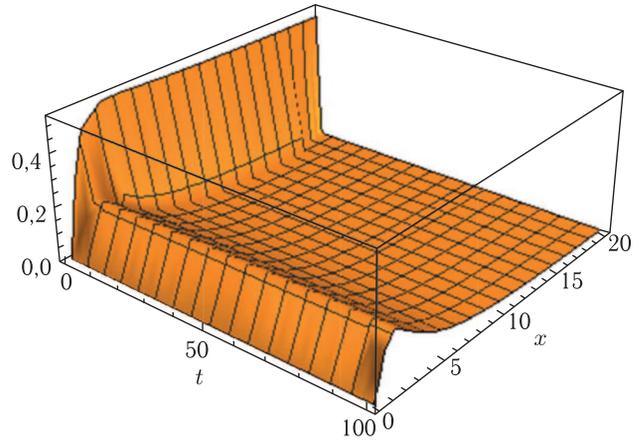
С учетом выражения для скорости звука,

$$c_s = \frac{\omega_D}{2\pi} \sqrt[3]{\left( \frac{4\pi}{3n} \right)}, \quad (39)$$

полное выражение для потока энергии будет иметь вид

$$\begin{aligned} J &= 3nc_s \frac{\Lambda_0}{(\tau\omega_D)^2} \times \\ &\times \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \left\{ \left( 1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{(1 + (\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}. \quad (40) \end{aligned}$$

Указанная зависимость полного потока энергии от комбинации внутренних характеристик кристалла, таких как частота Дебая  $\omega_D$  и время когерентности  $\tau$ , представлены на рис. 1. Хорошо видно, что при определенных соотношениях указанных параметров, а именно  $x = \tau\omega_D \sim 2$ , величина полного потока энергии не затухает со временем. Принимая во внимание указанные в работе [1]



**Рис. 1.** Полный поток энергии как функция времени  $t = t/\tau$  и обратного времени затухания  $x = \omega_D\tau$ . При  $x \sim 2$  наблюдается максимум потока и отсутствие затухания потока от времени

для арсенида бора (BAs) частоты Дебая акустических фононов  $\omega_D \sim 12.8$  ТГц и характерные времена когерентности  $\tau \sim 10^{-13}$  с, мы видим, что они укладываются в указанную оценку, что можно связать с установлением режима супертеплопроводности [1,24–27,31,32]. В работе [32] изучается динамика когерентных оптических фононов в теллуре после интенсивного воздействия фемтосекундного лазерного импульса. Основным механизмом аномальных тепловых явлений в материале, вплоть до «нетемпературного» фазового перехода, считается так называемый DECP (Displacive Excitation of Coherent Phonons). Показано, что время, необходимое носителю для диффузии на одну длину поглощения (50 нм), составляет около 600 фс =  $6 \cdot 10^{-13}$  с, характерные частоты, на которых наблюдаются резонансные эффекты теплопроводности, равны 3–3.6 ТГц. Наша оценка параметра  $x = \tau\omega$  составляет для данной системы  $x = \tau\omega = 1.8\text{--}2.16$ , что соответствует незатухающему потоку энергии, представленному на рис. 1.

Более того, чтобы не прибегать при оценке поведения наноразмерных объектов к справочным значениям скорости звука в кристалле или частоты Дебая, полученным для макроскопических материалов, можно воспользоваться микроскопическим значением частоты Дебая как максимально возможным значением частоты распространения гармонического возбуждения, соответствующим минимальной длине волны, равной двум постоянным решетки

а конкретного нанокристалла:

$$\omega_{max} = \frac{2\pi}{\lambda_{min}} \sqrt{\frac{\gamma}{m}} a = \pi \sqrt{\frac{\gamma}{m}},$$

в нашем случае константа взаимодействия вместо  $\gamma$  будет  $\Xi$ .

### 5. КОГЕРЕНТНЫЙ ТЕПЛОВОЙ ПОТОК ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ

Рассмотрим теперь задачу для конечных температур. Здесь необходимо учитывать весь континуум мод во всем спектре разрешенных частот. Спектральная плотность потока тепла с учетом конечной температуры должна учитывать тепловое распределение числа фононов в данной моде (функцию распределения Планка)

$$\begin{aligned} \langle j \rangle_{\omega T} &= \left\langle \frac{d\varepsilon}{d\omega} \right\rangle_T = \\ &= \hbar\omega c_s \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} |\alpha(t)|^2 \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \approx \\ &\approx \left( t \gg T = \frac{2\pi}{\omega} \right) \approx \hbar\omega \frac{\omega^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left( \frac{2\Lambda_0 T}{\hbar} \right)^2 \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\ &\xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar\omega^3}{c_s^2} \left( \frac{2\tau\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right). \end{aligned} \quad (41)$$

Зависимости спектральной плотности (41) от частоты представлены на рис. 2.

Для оценки параметров, возьмем выражение (41) в виде

$$j_\omega = \left( \frac{\hbar}{\tau T} \right) (\omega\tau) T \frac{(\tau\omega)^2}{(2\pi)^2 c_s^2} \left( \frac{2\Lambda_0}{\hbar} \right)^2 \times \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \left( \frac{1}{e^{(\hbar/\tau T)(\tau\omega)} - 1} \right),$$

$$\tau \sim 10^{-13}, \quad \frac{\hbar}{T} \sim 10^{-14} - 10^{-15}, \quad \frac{\hbar}{\tau T} \sim 0.1 - 0.01.$$

Рассмотрим полный поток с учетом температуры в низкотемпературном пределе,  $T \leq \Lambda_0$  (здесь температура записывается в энергетической шкале  $T = k_B T^\circ$ ). При этом следует учесть порядки величин: время когерентности  $\tau$  определяется характерными временами релаксации электронной системы

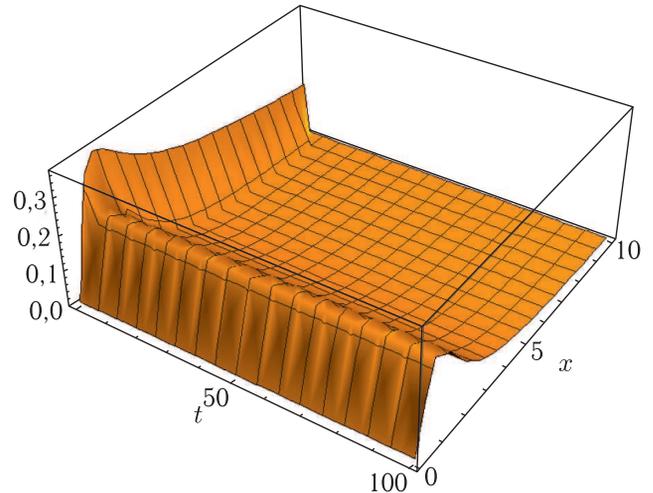


Рис. 2. Спектральная плотность потока с учетом равновесного распределения Планка. Здесь  $t = t/\tau$ ,  $x = \omega\tau$ . При заданном времени релаксации фононов имеется резонансная частота  $\omega^* \sim 3/2\tau$ , когда спектральная плотность потока не затухает со временем (сверхтеплопроводимость)

в твердом теле, т. е.  $\tau \sim 10^{-13}$  с. Характерный параметр, входящий в функцию распределения Планка,

$$\frac{\hbar}{k_B T^\circ} = \frac{10^{-27}}{1.4 \cdot 10^{-16} T^\circ} = \frac{10^{-11}}{1.4 \cdot T^\circ},$$

в диапазоне температур  $T^\circ$  от 300 до 1000 К, меняется:

$$\frac{\hbar}{k_B T^\circ} = \frac{10^{-11}}{1.4 \cdot T^\circ} \sim 10^{-14} - 10^{-15} \text{ с.}$$

Тогда необходимо учесть тот факт, что

$$\tau\omega > \frac{\hbar\omega}{k_B T^\circ},$$

т. е. мы имеем дело с квазиadiaбатическим взаимодействием, когда система может быть описана равновесной функцией распределения Планка. Условие малого градиента означает, что выполняется неравенство  $\tau c_s \ll l$ , где  $l$  – пространственный масштаб изменения температуры. Иными словами, само изменения температуры происходит на сравнительно больших временах,  $l/c_s \gg \tau$ , таким образом, интегрирование спектральной плотности потока по частоте с учетом температуры можно выполнять как при постоянной температуре:

$$\begin{aligned}
J &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \int_0^{\omega_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^2} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^2 d\omega = \\
&= \hbar \left( \frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^{\omega_D} \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \times \\
&\quad \times \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega. \quad (42)
\end{aligned}$$

### 5.1. Высокотемпературный предел

В случае фононного времени релаксации,  $\tau\omega_D > 1$ ,  $\hbar\omega_D/T \sim 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_{HT} &= \int_0^\infty \frac{\langle j \rangle_\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} d\omega = \left( \frac{\Lambda_0}{2\pi\hbar} \right)^2 \times \\
&\times \frac{T}{\tau c_s^2} \left[ \pi + \frac{1}{2} e^{-2t/\tau} \left\{ (\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right\} \right] = \\
&= \frac{3 n T c_s}{2 \tau \omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \times \\
&\times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \left[ (\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right] \right\} \quad (43)
\end{aligned}$$

(подробности вычисления см. в Приложении). Фактически мы приходим к классической линейной зависимости от температуры, возникающей в высокотемпературном пределе в макроскопическом кристалле. Однако здесь еще имеется вклад, напрямую связанный с временем когерентности  $\tau$ , который экспоненциально затухает со временем, что вполне согласуется с выводами в работ [14, 32, 33] для высокотемпературного предела с учетом когерентности фононов.

### 5.2. Низкотемпературный предел

1. В случае малого времени когерентности,  $\tau\omega_D < 1$ ,  $\hbar\omega_D/T \gg 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
J_{LT\tau} &\approx \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega\tau/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(1+(\tau\omega)^2)^2} d(\tau\omega) \approx
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \left( \frac{\tau T}{\hbar} \right)^4 \zeta_R(4) \Gamma(4) = \\
&= \frac{2}{5} n c_s \frac{(\pi T)^4}{(\hbar \omega_D)^3} \left( \tau \omega_D \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2, \quad (44) \\
&\zeta_R(4) = \frac{\pi^4}{90}.
\end{aligned}$$

Здесь учтено выражение (39) для скорости звука. Результат получается как для обычных тепловых фононов в отсутствие когерентности, если фактор когерентности  $(\tau\Lambda_0/\hbar) \rightarrow 1$ .

2. В случае большого время когерентности,  $\omega_D \tau > 1$ ,  $\hbar\omega_D/T \gg 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
J_{LT\tau} &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
&= \hbar \left( \frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\
&= J_{LTI} + J_{LTI}(t). \quad (45)
\end{aligned}$$

Здесь стационарная  $J_{LTI}$  и временная  $J_{LTI}(t)$  части теплового потока в низкотемпературном пределе имеют вид

$$\begin{aligned}
J_{LTI} &= \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar c_s} \right)^2 \frac{\hbar}{2\tau^4} \left( \frac{\tau T}{\hbar} \right)^2 \zeta_R(2), \\
J_{LTI}(t) &\approx \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^4 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times \\
&\times \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar(\tau\omega)/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(\tau\omega)^2} d(\tau\omega) = \\
&= \left( \frac{\Lambda_0}{2\pi\hbar^2 T} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^2} e^{-2t/\tau} \zeta_R(2) \Gamma(2), \\
\zeta_R(2) &= \frac{\pi^2}{6}.
\end{aligned} \quad (46)$$

Полный поток с учетом временной зависимости тогда имеет вид

$$\mathbf{J}_{LT\tau} = \frac{\pi^2 n c_s T^2}{2 \hbar \omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}. \quad (47)$$

Рассмотрим соответствующие вклады во внутреннюю энергию и теплоемкость. Для этого вычислим квантово-механическое среднее значение энергии для одной моды с частотой  $\omega$ :

$$\begin{aligned}
 \langle u \rangle &= \hbar\omega \langle \Psi(t) | \hat{n} | \Psi(t) \rangle = \\
 &= \hbar\omega |\alpha(t)|^2 |C(t)|^2 e^{|\alpha(t)|^2} = \\
 &= \hbar\omega |\alpha(t)|^2, \\
 \langle u \rangle_\omega &= \frac{d\varepsilon}{d\omega} = 4\pi\hbar\omega \frac{g_s\omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} |\alpha(t)|^2 = \quad (48) \\
 &= \hbar\omega \frac{3\omega^2}{2\pi^2 c_s^3} \left( \frac{2\Lambda_0\tau}{\hbar} \right)^2 \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{-t/\tau} \cos(\omega t + \arctg(\omega\tau))}{(1+(\tau\omega)^2)^{3/2}} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \\
 &\quad \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{6\hbar\omega^3}{c_s^3} \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2}.
 \end{aligned}$$

Удельная внутренняя энергия (без учета температуры) в единице объема равна

$$\begin{aligned}
 U &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega d\omega = \\
 &= 18 \frac{\Lambda_0^2}{\hbar\omega_D (\tau\omega_D)^2} n \left\{ \left( 1 - \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right) \ln(1+(\tau\omega_D)^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{(1+(\tau\omega_D)^2)} - 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} (\tau\omega_D)^2 \right\}. \quad (49)
 \end{aligned}$$

С учетом конечной температуры имеем выражение для внутренней энергии в виде

$$\begin{aligned}
 U(T) &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
 &= 6 \int_0^{\omega_D} \frac{|\alpha(t)|^2}{4\pi^2 c_s^3} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^2 d\omega = \\
 &= 6 \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^3} \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \times \\
 &\quad \times \left\{ \frac{1}{(1+(\tau\omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1+(\tau\omega)^2)} \right\} \omega^3 d\omega. \quad (50)
 \end{aligned}$$

### 5.3. Высокотемпературный предел

В случае большого времени когерентности (фононное время релаксации),  $\tau\omega_D > 1$ ,  $\hbar\omega_D/T \sim 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{HT}(T)}{V} &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\
 &= 3nT \frac{3}{\tau\omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \times \\
 &\quad \times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1+(\tau\omega_D)^2)] \right\}. \quad (51) \\
 C_V &= 3N \frac{3}{\tau\omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \times \\
 &\quad \times \left\{ \pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1+(\tau\omega_D)^2)] \right\}.
 \end{aligned}$$

Хорошо видно, что теплоемкость в высокотемпературном пределе не зависит от температуры, как и в случае «свободных» фононов в том же пределе, при этом сохраняет специфический вклад, обусловленный константой взаимодействия с электронной подсистемой, и характерный параметр времени когерентности.

### 5.4. Низкотемпературный предел

1. В случае малого времени когерентности,  $\tau\omega_D < 1$ ,  $\hbar\omega_D/T \gg 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
 \frac{U_{LT\tau}}{V} &\approx \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = 6 \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^3} \times \\
 &\quad \times \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega\tau/\tau T} - 1} \right) \frac{(\tau\omega)^3}{(1+(\tau\omega)^2)^2} d(\tau\omega) \approx \\
 &\quad \approx \left( \frac{\tau\Lambda_0}{\pi\hbar} \right)^2 \frac{6\hbar}{\tau^4 c_s^3} \left( \frac{\tau T}{\hbar} \right)^4 \zeta_R(4)\Gamma(4) = \\
 &= \frac{12}{5} n \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \left( \tau\omega_D \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2, \quad (52) \\
 C_V &= \frac{12}{5} N\pi^4 \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3} \frac{4}{\pi} \left( \tau \frac{\Lambda_0}{\hbar} \right)^2.
 \end{aligned}$$

Здесь учтено выражение (39) для скорости звука. Для сравнения приведем выражение для теплоемкости кристалла в фононной модели в низкотемпературном пределе:

$$C_V = \frac{4}{5} \pi^4 g_s N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3} = \frac{12}{5} \pi^4 N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3}.$$

Отсюда следует, что характерная температурная зависимость ( $\sim T^3$  — закон Дебая) сохраняется, но при этом появляются дополнительные множители, включающие в себя зависимость от длительности импульса возбуждения  $\tau$  (время когерентности) и константы поляритон-фононного взаимодействия. Будучи измеримой величиной, теплоемкость позволит «увидеть» наличие фононной когерентности.

2. В случае большого времени когерентности,  $\omega_D \tau > 1$ ,  $\hbar \omega_D / T \gg 1$ , имеем

$$\begin{aligned}
 U_{LTT} &= \int_0^{\omega_D} \langle u \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \right) d\omega = 6 \frac{\hbar}{c_s} \left( \frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \times \\
 &\times \int_0^\infty \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau \omega)^2)^2} + \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau \omega)^2)} \right\} \times \\
 &\times \left( \frac{1}{e^{\hbar \omega / T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\
 &= \frac{18 n T^2}{\hbar \omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \zeta_R(2) \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\} = \\
 &= 3 \pi^2 n \frac{T^2}{\hbar \omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}, \\
 C_V &= 6 \pi^2 N \frac{T}{\hbar \omega_D} \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar \omega_D} \right)^2 \left\{ 1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{53}$$

В случае большой длительности импульса (времени когерентности) когерентные состояния фононов придают особые отличительные черты тепловой зависимости, а именно теплоемкость решетки приобретает нехарактерную линейную зависимость от температуры, которая возникает у вклада в теплоемкость свободных электронов в металле — вырожденный электронный газ:

$$C_V = \frac{N}{2} \pi^2 \left( \frac{T}{\varepsilon_F} \right).$$

## 6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключении следует отметить, что рассмотренная модель формирования когерентных фононов в трехмерном кристалле, где предварительно предполагается поляритонная генерация среды лазерным импульсом, носит абстрактный характер и не привязана к конкретному эксперименту. Фиксированным фактом при проведении аналитического расчета являлась размерность системы (кристалла) — 3D, т.е. как электроны, так и фононы могут

свободно распространяться по трем ортогональным осям. Выражение (35) для спектрального потока «молчаливо» подразумевает пересчет от

$$d^3 k \rightarrow \frac{g_s \omega^2}{(2\pi)^3 c_s^3} \frac{2\pi}{3} d\omega.$$

Рассмотрение систем пониженной размерности (квазидвумерный или квазиодномерный кристалл) естественно приведет к изменению выражений как спектральной плотности потока, так и выражений для полных потоков, поскольку связано с изменением плотности микросостояний на интервал энергии. Более подробное рассмотрение влияния изменения размерности системы на характер формирования когерентных состояний фононов безусловно является самостоятельной проблемой.

Что же касается рассмотренной трехмерной модели образования когерентных фононов, несмотря на абстрактность постановки, она имеет свое независимое экспериментальное подтверждение. Так, импульсное возбуждение и фазочувствительное обнаружение когерентных фононов и фонон-поляритонов обеспечивают детальное понимание динамических свойств материи. Эксперименты [33], основанные на методах оптической накачки с фемтосекундным временным разрешением, позволяют одновременно определять амплитуду и фазу когерентного движения решетки. Частоты в терагерцевом диапазоне и времена расфазировки в пикосекундном диапазоне получены с высокой точностью, особенно в полупроводниках и полупроводниковых гетероструктурах, где когерентная фононная мода и свободные носители возбуждаются одновременно, что несет важную информацию о взаимодействии носителей с фононами вдали от равновесия.

В статье [33] представлен обзор последних достижений в этой области физики конденсированного состояния. Возбуждение когерентных ЛО-фононов осуществляется за счет механизма экранирования поля. Два последовательных импульса накачки воздействуют на образец. Их интенсивность и временная задержка регулируются таким образом, чтобы второй импульс обеспечивал движущую силу для когерентной амплитуды, эквивалентной амплитуде, сохраняющейся от первого импульса. Кроме того, начальное поверхностное поле регулируется через прозрачный контакт Шоттки, чтобы не экранировать поверхностное поле полностью уже с первым импульсом. Тщательно регулируя разделение импульсов, движущая сила находится в фазе или в противофазе с первоначально генерируемой коге-

Таблица. Выражения для величины потока энергии в разных моделях

Температура/ Модель	Когерентные состояния	Тепловые фононы	Классическая модель
Низкотемпературный предел $\hbar\omega_D/T \gg 1$	$\tau\omega_D < 1,$ $J_{LT\tau} = \frac{2}{5}nc_s \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} (\tau\omega_D)^2 \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2.$ $\omega_D\tau > 1,$ $J_{LT T} = 3nc_s \frac{T^2}{\hbar\omega_D} \zeta_R(2) \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2 \left\{1 + \frac{e^{-2t/\tau}}{2}\right\}$	$J_{LT} = \frac{\pi^4}{10}c_s n \frac{T^4}{(\hbar\omega_D)^3}$	—
Высокотемпературный предел $\hbar\omega_D/T \sim 1$	$J_{HT} = \frac{3}{2\tau\omega_D} nTc_s \left(\frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D}\right)^2 \times$ $\left\{\pi + \frac{e^{-2t/\tau}}{2} [(\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2)]\right\}$	$J = \frac{c_s n T}{2}$	$J(x, t) \propto 2kT \frac{x}{\tau} e^{-t/\tau}$

рентной модой. Таким образом, наблюдается полное разрушение или резонансное усиление когерентных ЛО-фононов. Этот метод позволяет генерировать когерентные ЛО-фононы в течение четко определенного интервала времени, меньшего, чем собственное время дефазировки ЛО-фононов.

Подобные эксперименты проводятся в Sb, где аналогичным образом манипулируют модой А. В смешанных кристаллах BiSb колебания Bi–Bi, Bi–Sb и Sb–Sb можно усиливать и подавлять, применяя последовательности фемтосекундных импульсов. Здесь важно отметить, что во всех указанных экспериментах имеет место общая закономерность, обнаруженная в нашей работе, а именно сам эффект усиления ЛО-фононов с незатухающей теплопроводностью имеет место в различных материалах при выполнении критерия  $x = \tau\omega^* \sim 2$ , где  $\tau$  — время когерентности  $\omega^*$  — частота, на которую приходится максимум спектральной плотности энергии.

В указанной работе  $\tau = 0.25$  Пс  $= 0.25 \cdot 10^{-12}$  с,  $\omega^* = 8.8$  ТГц  $= 8.8 \cdot 10^{12}$  Гц,  $\tau\omega^* = 2.2$ .

Для объемного GaAs  $\tau = 0.25$  Пс,  $\omega^* \sim 9$  ТГц,  $x = \tau\omega^* = 2.25$ .

Для GaAs/A<sub>10.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As-сверхрешетки  $\tau = 0.2$  Пс,  $\omega^* = 8.5$  ТГц,  $x = \tau\omega^* = 1.7$ .

Для изотропного кристалла Te  $\omega^* = 3.5$  ТГц,  $\tau = 0.6$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2.1$ ,

Для анизотропного кристалла Te  $\omega^* = 4.2$  ТГц,  $\tau = 0.5$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2.1$ .

В эксперименте по терагерцевой эмиссии для кристалла InP наблюдается широкий пик при  $\omega^* = 1$  ТГц,  $\tau = 2$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2$ .

При исследовании когерентной фононной динамики в монокристалле Te, возбуждаемом усиленными лазерными импульсами СРМ с энергией фотонов 2 эВ, получено  $\omega^* = 3.6$  ТГц,  $\tau = 0.75$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2.7$ .

Для ВТСП-материала (YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7-x</sub> — тонкая пленка) для моды Ва в плоскости CuO<sub>2</sub> получено  $\omega^* = 3.6$  ТГц,  $\tau = 0.7$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2.52$ , а для моды Cu (2) в плоскости CuO<sub>2</sub> имеем  $\omega^* = 4.2$  ТГц,  $\tau = 0.7$  Пс,  $x = \tau\omega^* = 2.8$ .

Обобщенные результаты приведены в таблице.

Сравнивая все три модели описания тепловых потоков, можно заметить совпадение в характере временной зависимости, а именно экспоненциальное убывание в классической модели с моделью когерентных фононов в высокотемпературном пределе. Однако в случае когерентных вкладов указанное убывание происходит быстрее в силу коэффициента 2 в показателе временной экспоненты. При этом температурная зависимость в высокотемпературном пределе одинакова во всех трех моделях, а именно линейная по температуре.

В случае предела низких температур классическое рассмотрение смысла не имеет, особенно если речь идет о нанокристаллах или тонких пленках и квантовых шнурах. Фононная модель применима для указанных квантовых пределов, более того, она эффективно описывает случаи достаточно сильного электрон-фононного взаимодействия, обусловленного механизмом поляритонной генерации, но в этом случае совместно решается система «зацепляющихся» нелинейных уравнений, связывающих электронную и колебательную компоненты. В таблице это решение не отражено, подробно см. [5]. В таблице при-

ведены результаты для тепловых свойств свободных фононов. Что же касается временной зависимости потока в низкотемпературном пределе, то предполагаемая в работе [14] временная зависимость гауссового типа в режиме когерентных фононов не возникает, она сохраняет экспоненциальный вид с удвоенным коэффициентом уменьшения ( $\sim e^{-2t/\tau}$ ). Сама когерентность отражается в выражении для потока в виде множителя, содержащего отношение константы поляритон-фононного взаимодействия и энергии Дебая ( $\sim (\tau\omega_D)^2 (\Lambda_0/\hbar\omega_D)^2$ ), а также в случае короткого времени когерентности в виде дополнительного множителя  $(\tau\omega_D)^2 < 1$ . При этом сама зависимость потока от времени когерентности и константы взаимодействия с электронной подсистемой естественным образом переходит в выражение для теплового потока свободных фононов

$$J_{LT\tau} = \frac{nc_s}{10} \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3} \left\{ (2\tau\omega_D)^2 \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \right\} \rightarrow \\ \rightarrow J_{LT} = \frac{nc_s}{10} \frac{(\pi T)^4}{(\hbar\omega_D)^3},$$

если

$$\left\{ (2\tau\omega_D)^2 \left( \frac{\Lambda_0}{\hbar\omega_D} \right)^2 \right\} \rightarrow 1,$$

т.е. когда в системе имеется некий «резонанс» параметров, время когерентности и константа поляритон-фононного взаимодействия связаны как

$$\left( \frac{2\tau\Lambda_0}{\hbar} \right) \rightarrow 1,$$

что по существу является соотношением неопределенностей (энергия–время)

$$\Lambda_0\tau \geq \left( \frac{\hbar}{2} \right),$$

минимизированным асимптотически именно в результате когерентности состояния колебательной системы. Доказательство утверждения о минимизации соотношения неопределенностей «координата–импульс» когерентными состояниями можно найти в книге [29].

#### ПРИЛОЖЕНИЕ А. СВОЙСТВА СОСТОЯНИЙ ШРЕДИНГЕРА

1. Линейное преобразование операторов рождения/уничтожения (11) осуществляется оператором унитарного преобразования

$$\hat{U} = e^{\hat{D}},$$

где  $\hat{D}$  должен быть эрмитовым оператором,  $\hat{D} = \hat{D}^\dagger$ . Имеем

$$B = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \hat{b} + \frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Разложение для операторной экспоненты

$$B = \hat{b} + \frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k} = e^{-\hat{D}} \hat{b} e^{\hat{D}} = \\ = \hat{b} + [\hat{b}\hat{D}] + \left[ \hat{b} [\hat{b}\hat{D}] \right] + \left[ \hat{b} [\hat{b} [\hat{b}\hat{D}]] \right] + \dots$$

Оператор  $\hat{D}$  имеет вид

$$\hat{D} = c(\hat{b}^\dagger - \hat{b}),$$

где

$$c = -\frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k},$$

что представляет собой частный случай оператора унитарного преобразования

$$\hat{U}(\alpha) = e^{(\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b})}$$

с вещественной функцией

$$\alpha = -\frac{\Lambda_{k\lambda}}{\hbar\omega_k}.$$

Оно преобразует «старую» функцию вакуума  $|n_{k\lambda}\rangle = |0\rangle$  в соответствующий «новый» вакуум, отвечающий состоянию

$$|\nu_{k\lambda} = 0\rangle = |\alpha\rangle = \hat{U}(\alpha) |n_{k\lambda} = 0\rangle = \\ = e^{(\alpha^* \hat{b}^\dagger - \alpha \hat{b})} |n_{k\lambda} = 0\rangle.$$

2. Разложение состояния  $|\alpha\rangle$  по полному набору осцилляторных фононных состояний  $|n\rangle$  (при аналогичном описании фотонов их называют фоковскими состояниями) имеет вид

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle,$$

$$\alpha \langle n|\alpha\rangle = \langle n|\hat{b}|\alpha\rangle = \langle n|\hat{b}|n+1\rangle \langle n+1|\alpha\rangle = \\ = \sqrt{n+1} \langle n+1|\alpha\rangle,$$

$$\langle n+1|\alpha\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \langle n|\alpha\rangle.$$

Отсюда следует

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle.$$

Таким образом,

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}.$$

«Нулевой» коэффициент разложения  $\langle 0|\alpha\rangle$  определяется из условия нормировки  $|\alpha\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\alpha\rangle &= \sum_{n'=0}^{\infty} \langle \alpha|n'\rangle \langle n'|\sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \\ &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^{*n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} = \\ &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} = 1, \end{aligned}$$

$$|\langle 0|\alpha\rangle| = e^{-|\alpha|^2/2}.$$

Среднее число фононов в когерентном состоянии равно

$$\begin{aligned} \langle n\rangle &= \langle \alpha|\hat{b}^\dagger \hat{b}|\alpha\rangle = \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^{*n'}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|\hat{b}^\dagger \hat{b}|n\rangle \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} = \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2(n-1)}}{(n-1)!} \equiv \\ &\equiv |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2k}}{k!} = |\alpha|^2 e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = |\alpha|^2. \end{aligned}$$

Когерентное состояние имеет вид

$$|\alpha\rangle = e^{-\langle n\rangle/2} \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \frac{\sqrt{\langle n\rangle^n}}{\sqrt{n!}}.$$

Следовательно, вероятность обнаружить число фононов равное  $n$  в заданном когерентном состоянии со средним числом фононов  $\langle n\rangle$  подчиняется распределению Пуассона:

$$W_n = e^{-\langle n\rangle} \frac{\langle n\rangle^n}{n!}.$$

### 3. Унитарный оператор

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{\langle n\rangle}{2}} e^{\alpha^* \hat{b}^\dagger} e^{-\alpha \hat{b}}, \quad \alpha^* = \alpha,$$

обладает следующими свойствами:

- 1)  $\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) = 1$ ,
- 2)  $\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}(-\alpha)$ ,
- 3)  $\hat{D}(\beta)\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{\beta\alpha^* - \beta^*\alpha}{2}} \hat{D}(\beta + \alpha) \Rightarrow$   
 $\Rightarrow \hat{D}(\beta)\hat{D}(\alpha) = e^{-\beta\alpha^* - \beta^*\alpha} \hat{D}(\alpha)\hat{D}(\beta)$ ,

$$[\hat{b}\hat{D}(\alpha)] = \alpha\hat{D}(\alpha),$$

$$[\hat{b}^\dagger\hat{D}(\alpha)] = \alpha^*\hat{D}(\alpha),$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{b}\hat{D}(\alpha) = \hat{b} + \alpha,$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{b}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{b}^\dagger + \alpha^*.$$

4. Рассмотрим свойство полноты и неортогональность. Известно, что когерентные состояния  $|\alpha\rangle$  и  $|\beta\rangle$ , различающиеся средним числом фононов в данной моде  $\langle N\rangle \neq \langle K\rangle$ , являются неортогональными состояниями:

$$\begin{aligned} \langle \alpha|\beta\rangle &= e^{-\frac{\langle N\rangle + \langle K\rangle}{2}} \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\sqrt{\langle N\rangle^{n'}}}{\sqrt{n'!}} \langle n'|n\rangle \frac{\sqrt{\langle K\rangle^n}}{\sqrt{n!}} = \\ &= \exp\left(-\frac{(\sqrt{\langle K\rangle} - \sqrt{\langle N\rangle})^2}{2}\right), \end{aligned}$$

$$|\langle \alpha|\beta\rangle|^2 = \exp\left(-(\sqrt{\langle K\rangle} - \sqrt{\langle N\rangle})^2\right).$$

Между тем, они обладают свойством полноты, которое позволяет по этим состояниям разлагать в ряд произвольный вектор состояния:

$$\begin{aligned} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha &= \int \sum_{\substack{n=0 \\ n'=0}}^{\infty} \frac{\alpha^n \alpha^{*n'}}{\sqrt{n!}\sqrt{n'!}} |n\rangle \langle n'| e^{-|\alpha|^2} d^2\alpha = \\ &= \pi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle \langle n|}{n!} \Gamma(n+1) = \pi \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|. \end{aligned}$$

Таким образом, свойство полноты может быть записано в виде

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| = \hat{1}.$$

5. В работе [29] подробно показано, что когерентные состояния минимизируют соотношение неопределенностей. В координатном представлении, где

$$\begin{aligned} \hat{b}^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{Q} + \frac{\hat{P}}{i\omega m} \right), \quad \hat{b} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{Q} - \frac{\hat{P}}{i\omega m} \right), \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hat{b}^\dagger - \hat{b} = -\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial Q}, \end{aligned}$$

указанное когерентное состояние с учетом описанного унитарного преобразования отвечает так называемому осциллятору со смещенным центром:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha(Q) &= e^{\alpha(\hat{b}^\dagger - \hat{b})} \psi_0(Q) = &= \frac{\pi}{4} \left( \frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{T}{\tau c_s^2}, \\ &= e^{-\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha \frac{\partial}{\partial Q}} \psi_0(Q) = \psi_0 \left( Q - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \alpha \right), \end{aligned}$$

$$\Psi_\alpha(Q) = \psi_0 \left( Q + \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \frac{\Lambda}{\hbar \omega} \right). \quad II(t) = \left( \frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4c_s^2} e^{-2t/\tau} \times$$

Здесь функции основного состояния гармонического осциллятора с частотой  $\omega$  обозначены как  $\psi_0(Q)$ , и когерентного состояния — как

$$\Psi_\alpha(Q) = \Psi_{\langle n \rangle}(Q).$$

**ПРИЛОЖЕНИЕ В.  
ИНТЕГРАЛЫ**

1. Рассмотрим высокотемпературный предел  $\hbar\omega/T \sim 1$ ,  $\tau\omega \gg 1$ ,  $\Rightarrow \hbar(\omega\tau)/\tau T \sim 1$ . Тогда

$$\begin{aligned} J &= \int_0^{\omega_D} \langle j \rangle_\omega \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) d\omega = \\ &= \hbar \left( \frac{\Lambda_0 \tau}{\hbar \pi c_s} \right)^2 \int_0^{\omega_D} \left\{ \frac{1}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} \frac{e^{-2t/\tau}}{4(1 + (\tau\omega)^2)} \right\} \times \\ &\quad \times \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \omega^3 d\omega = \\ &= I + II(t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} I &= \left( \frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{c_s^2} \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)^2} d\omega = \\ &= [\tau\omega = x] = \left( \frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \times \\ &\quad \times \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \int_0^\infty \left( \frac{1}{e^{\hbar x/\tau T} - 1} \right) \frac{(x)^3}{(1 + x^2)^2} dx \approx \\ &\quad \approx \left[ x > 1, \frac{\hbar x}{\tau T} < 1 \right] \approx \\ &\quad \approx \left( \frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \frac{T\tau}{\hbar} \int_0^\infty \frac{x^2}{(1 + x^2)^2} dx = \\ &= \left( \frac{\tau \Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{\tau^4 c_s^2} \frac{T\tau}{\hbar} \left\{ -\frac{x}{(1 + x^2)} + \frac{1}{2} \operatorname{arctg} x \right\}_0^\infty = \end{aligned}$$

$$\times \int_0^{\omega_D} \left( \frac{1}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \right) \frac{\omega^3}{(1 + (\tau\omega)^2)} d\omega =$$

$$= \left( \frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^2 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times$$

$$\times \int_0^{\tau\omega_D} \left( \frac{1}{e^{\hbar x/\tau T} - 1} \right) \frac{x^3}{(1 + x^2)} dx \approx$$

$$\approx \left[ \tau\omega = x > 1, \frac{\hbar x}{\tau T} < 1 \right] \approx \left( \frac{\Lambda_0}{\pi \hbar} \right)^2 \frac{\hbar}{4\tau^2 c_s^2} e^{-2t/\tau} \times$$

$$\times \int_0^{\tau\omega_D} \left( \frac{1}{1 + \frac{\hbar x}{\tau T} - 1} \right) \frac{x^3}{(1 + x^2)} dx =$$

$$= \left( \frac{\Lambda_0}{2\pi \hbar} \right)^2 \frac{T}{2\tau c_s^2} e^{-2t/\tau} \left\{ (\tau\omega_D)^2 - \ln(1 + (\tau\omega_D)^2) \right\}.$$

2. Рассмотрим внутреннюю энергию и поток энергии кристаллической решетки для свободных фононов. Для сравнения приведем известные выражения для плотности потока и внутренней энергии для свободных тепловых фононов:

$$\begin{aligned} J &= \frac{2\pi}{3} \frac{g_s c_s}{(2\pi c_s)^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/T} - 1} \omega^2 d\omega = \\ &= \frac{2\pi}{3} \frac{g_s c_s}{(2\pi \hbar c_s)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{g_s c_s}{2(\hbar\omega_D)^3} n T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \end{aligned}$$

$$\Theta_D = \frac{\hbar\omega_D}{T}.$$

В низкотемпературном пределе,  $\hbar\omega/T = \Theta_D \gg 1$ ,  
имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} T^4 \Gamma(4) \zeta_R(4) = c_s n \frac{\pi^4 T^4}{10(\hbar\omega_D)^3} \mathbf{e}_z, \\ U &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \Gamma(4) \zeta_R(4) = \frac{\pi^4}{5} g_s N \frac{T^4}{(\hbar\omega_D)^3}, \\ C_V &= \frac{12}{5} \pi^4 N \frac{T^3}{(\hbar\omega_D)^3}, \quad g_s = 3. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили закон Дебая:  
 $C \propto T^3$ .

В высокотемпературном пределе,  $\hbar\omega/T = \Theta_D \leq 1$ ,  
имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4}{2(\hbar\omega_D)^3} \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{1 + x - 1} dx = \\ &= c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T^4 \Theta_D^3}{6(\hbar\omega_D)^3} = c_s n \frac{g_s \mathbf{e}_z T}{6} = \frac{c_s n T}{2} \mathbf{e}_z, \\ U &= \frac{3Ng_s}{(\hbar\omega_D)^3} T^4 \int_0^{\Theta_D} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = Ng_s T = 3NT, \\ C_V &= 3N. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили закон Дюлонга-  
Пти.

### ПРИЛОЖЕНИЕ С

Рассмотрим классическую задачу теплопроводности для полубесконечной среды с граничными

условиями третьего рода. Для внутренней энергии

$$u = \alpha N k_B T,$$

где  $N = nV$  — полное число частиц в системе,  $\alpha$  — численный множитель (т.е.  $u \propto k_B T$ ), имеет место уравнение теплопроводности

$$\dot{u} - \kappa u'' = f(x, t)$$

с граничными и начальными условиями

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left( \frac{\partial u}{\partial x} + hu \right)_{x=l} = 0,$$

$$u(x, 0) = \varphi(x) = 0,$$

$$f(x, t) = \frac{\Psi(x, t)}{C_p n} = e^{-\alpha t} f_0 \begin{cases} 1, & x \leq x_0, \\ 0, & x > x_0, \end{cases}$$

$$f_0 = \frac{\Psi_0}{C_p n},$$

$$\dot{u} - \kappa u'' = 0, \quad u = X(x)T(t),$$

$$\Rightarrow \frac{\dot{T}(t)}{\kappa T(t)} = \frac{X''(x)}{X(x)} = -\lambda.$$

Здесь  $\kappa = K/C_p n$  — коэффициент «теплопроводности»,  $C_p$  — безразмерная теплоемкость,  $K$  [(см·с)<sup>-1</sup>] — коэффициент теплопроводности,  $n$  — концентрация. Получаем

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \sum_n \frac{2}{\gamma_n} \cos\left(\frac{\gamma_n}{l} x\right) \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x_0\right) \times \\ &\quad \times \frac{1 - \exp\left(-t\left(\kappa\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - \frac{1}{\tau}\right)\right)}{\kappa\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - \frac{1}{\tau}} e^{-\frac{t}{\tau}}, \end{aligned}$$

где  $\gamma_n$  — решение трансцендентного уравнения

$$\operatorname{tg} \gamma = \frac{hl}{\gamma} \Rightarrow \gamma_n = b_n l.$$

Плотность потока тепла равна

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(x, t) &= -K \mathbf{e}_x \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = \\ &= \mathbf{e}_x \frac{2\kappa\tau}{l} \Psi_0 \sum_n \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x\right) \sin\left(\frac{\gamma_n}{l} x_0\right) \times \\ &\quad \times \frac{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\left(\kappa\tau\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - 1\right)\right)}{\kappa\tau\left(\frac{\gamma_n}{l}\right)^2 - 1} e^{-\frac{t}{\tau}}. \end{aligned}$$

С учетом того, что решения

$$\gamma_n \rightarrow \frac{\pi}{2}(2n+1),$$

плотность потока энергии будет равна

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(x, t) \rightarrow \mathbf{e}_x \frac{2\kappa\tau}{l} \Psi_0 \times \\ \times \sum_n \sin\left(\frac{\pi}{2}(2n+1)\frac{x}{l}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}(2n+1)\frac{x_0}{l}\right) \times \\ \times \frac{1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau} \left(\kappa\tau \left(\frac{\pi}{2}\frac{(2n+1)}{l}\right)^2 - 1\right)\right)}{\kappa\tau \left(\frac{\pi}{2}\frac{(2n+1)}{l}\right)^2 - 1} e^{-\frac{t}{\tau}}. \end{aligned}$$

## ЛИТЕРАТУРА

1. Suixuan Li, Zihao Qin, Huan Wu, Man Li, M. Kunz, A. Alatas, A. Kavner, and Yongjie Hu, *Anomalous Thermal Transport under High Pressure in Boron Arsenide*, Nature, www.nature.com/https://doi.org/10.1038/s41586-022-05381-x.
2. S. Lepri, R. Livi, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **125**, 040604 (2020).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, Теоретическая физика*, том 5, Наука, Физматлит, Москва (1964).
4. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика. Теория конденсированного состояния, Теоретическая физика*, том 9, Наука, Физматлит, Москва (1978).
5. А. В. Юлин, А. В. Пошакинский, А. Н. Поддубный, ЖЭТФ **161**, 206 (2022), doi: 10.31857/S0044451022020067.
6. P. Cipriani, S. Denisov, and A. Politi, Phys. Rev. Lett. **94**, 244301 (2005).
7. C. B. Mendland H. Spohn, Phys. Rev. Lett. **111**, 230601 (2013).
8. A. Dhar, A. Kundu, and A. Kundu, Front. Phys. **7**, 159 (2019).
9. H. Spohn, J. Stat. Phys. **124**, 1041 (2006).
10. A. Mielke, Arch. Ration. Mech. Anal. **181**, 401 (2006).
11. J. Lukkarinen, *Kinetic Theory of Phonons in Weakly Anharmonic Particle Chains*, Springer (2016), p. 159.
12. M. N. Luckyanova, J. Garg, K. Esfarjani, A. Jandl, M. T. Bulsara, A. J. Schmidt, A. J. Minnich, S. Chen, M. S. Dresselhaus, and Z. Ren, Science **338**, 936 (2012).
13. J. Ravichandran, A. K. Yadav, R. Cheaito, P. B. Rossen, A. Soukiassian, S. Suresha, J. C. Duda, B. M. Foley, C.-H. Lee, and Y. Zhu, Nat. Mater. **13**, 168 (2014).
14. Z. Zhang, Y. Guo, M. Bescond, J. Chen, M. Nomura, and S. Volz, Heat Conduction Theory Including Phonon Coherence, APL Mater. **9**, 081102 (2021).
15. M. Simoncelli, N. Marzari, and F. Mauri, Nat. Phys. **15**, 809 (2019).
16. L. Isaeva, G. Barbalinardo, D. Donadio, and S. Baroni, Nat. Commun. **10**, 3853 (2019).
17. Z. Zhang, Y. Guo, M. Bescond, J. Chen, M. Nomura, and S. Volz, Phys. Rev. B **103**, 184307 (2021).
18. S. Hu, Z. Zhang, P. Jiang, J. Chen, S. Volz, M. Nomura, and B. Li, J. Phys. Chem. Lett. **9**, 3959 (2018).
19. M. Först, H. Kurz, T. Dekorsy, and R. P. Leavitt, Phys. Rev. B **67**, 8, 085305 (2003).
20. P. Delsing, A. N. Cleland, M. J. A. Schuetz et al., J. Phys. D **52**, 353001 (2019).
21. S. Hu, Z. Zhang, P. Jiang, J. Chen, S. Volz, M. Nomura, and B. Li, J. Phys. Chem. Lett. **9**, 3959 (2018).
22. L. Lindsay, D. A. Broido, and T. L. Reinecke, Phys. Rev. Lett. **111**, 25901 (2013).
23. J. S. Kang, M. Li, H. Wu, H. Nguyen, and Y. Hu, Science **361**, 575 (2018).
24. S. Li et al., Science **361**, 579 (2018).
25. F. Tian et al., Science **361**, 582 (2018).
26. J. S. Kang et al., Nat. Electron **4**, 416 (2021).
27. Y. Cui, Z. Qin, H. Wu, M. Li, and Y. Hu, Nat. Commun. **12**, 1284 (2021).

28. А. Анималу, *Квантовая теория кристаллических твердых тел*, Мир, Москва (1981), (Alexander O. E. Animalu, *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids*, Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1977).
29. А. Н. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Физматлит, Москва (1971).
30. E. V. Orlenko and V. K. Khersonsky, *Emission and Absorption of Photons in Quantum Transitions. Coherent States*, in: *Quantum Science: The Frontier of Physics and Chemistry*, ed. by T. Onishi, Springer, Singapore (2022), p. 349, [https://doi.org/10.1007/978-981-19-4421-5\\_6](https://doi.org/10.1007/978-981-19-4421-5_6).
31. R. Berman, F. E. Simon, and J. Wilks, *Nature* **42se**, 277 (1951).
32. S. Hunsche, K. Wieneke, T. Dekorst, and H. Kurz, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1815 (1995).
33. T. Dekorsy, G.C. Cho, and H. Kurz, *Coherent Phonons in Condensed Media*, in: *Light Scattering in Solids VIII. Topics in Applied Physics*, ed. by M. Cardona and G. Güntherodt, Vol 76, Springer, Berlin, Heidelberg (2000), <https://doi.org/10.1007/BFb0084242>.