中山大学学报（自然科学版）
第28卷 第4期 ACTA SCIENTIARUM NATURALIUM Vol.28 №.4
1989年 UNIVERSITATIS SUNYATSENI 1989

·研究简报·

组份调制结构超声电子弛豫吸收

邹南之

（材料科学研究所）

摘　要

本文用玻尔兹曼方程计算了组份调制结构超声的电子弛豫吸收，着重于讨论电荷密度的周期调制效应及声场调制效应对超声吸收特性的影响。

关键词 组份调制结构，超声吸收，电荷密度调制

1 引　言

组份调制结构，简称CMS，是两种组份相对浓度按一定周期变化的复合材料[1,2]。组成CMS的两种材料费米能差异会产生一个垂直于界面方向的静电场，使系统电子的密度形成一个空间分布[3]。系统的力学参量亦有周期性变化，这些都会对超声的传播和吸收产生影响[4]。本文主要讨论超声垂直于界面传播时金属CMS的超声吸收问题。为简单起见，假定组成CMS的材料有相同的价电子数，如Nb/Cu。

晶体中有多种过程引起声波的损耗，如晶格缺陷的散射，热声子散射等等。在低温下，电子对超声的散射是主要因素，这里只考虑电子弛豫过程引起的声波衰减。声波通过晶体会产生一个伴随的电磁场，使电子激发，然后通过电子与杂质的碰撞把能量耗散。单位体积的平均声波能量损耗[5]

$$\overline{Q}=\int Re\left(\vec{j}_e^{\,*}\cdot\vec{\varepsilon}\right)\mathrm{d}V/2V \tag{1}$$

这里$\vec{j}_e$是电子电流，$\vec{\varepsilon}$是电场。Pipard首先讨论了均匀材料的电子弛豫吸收[6]，后来Cohen等人用玻尔兹曼方程方法作了比较系统的讨论[5]，结果与实验符合比较好。我们用玻尔兹曼方程研究电荷密度调制效应及CMS中声波的调制效应对超声吸收的影响。

在大多数情况下，CMS的周期至少几十Å，可以近似用分布函数$f(\vec{r},\vec{k})$描述电子的分布特征。由于组成CMS的两种金属材料费米能不同，系统内存在一个垂直于界面（z方向）的内电场$\vec{\varepsilon}_0(z)$，不存在外场时分布函数满足平衡态玻尔兹曼方程：

$$\vec{V}(\vec{k})\cdot\partial f_1(\vec{r},\vec{k})/\partial\vec{r}-\frac{e}{\hbar}\vec{\varepsilon}_0(z)\cdot\partial f_1(\vec{r},\vec{k})/\partial\vec{k}=0$$

保留ε_0的线性项，解得

本文1988年9月13日收到

$$f_1(\vec{r},\vec{k})\approx f_0(\vec{k})+(\partial f_0/\partial E)\sum_{n\neq 0}e\,\varepsilon_{0n}e^{i2\pi nz/L}L/i2\pi n \tag{2}$$

L是调制周期，ε_{0n}是$\overrightarrow{\varepsilon_0}(z)$空间富氏级数展开的第$n$个分量。$f_0(\vec{k})$是费米分布函数

$$f_0(\vec{k})=2/(\exp[(E(\vec{k})-E_F^0)/K_BT]+1)$$

$E(\vec{k})$是CMS的电子能谱，E_F^0是相应的费米能。

2　超声吸收的计算

在CMS上激发一个垂直于界面传播的超声场，用$\delta\vec{R}(\vec{r},t)$表示晶格的位移，$\vec{U}(\vec{r},t)$表示离子的速度，$\vec{U}(\vec{r},t)=\partial\delta\vec{R}(\vec{r},t)/\partial t$。设$\delta\vec{R}(\vec{r},t)=\delta\vec{R}(z)e^{-i\omega t}$，$\omega$为超声场的频率。在超声场作用下，电子将偏离平衡态分布，电子分布函数$f(\vec{r},\vec{k},t)$满足的玻尔兹曼方程为[7]

$$\partial f(\vec{r},\vec{k},t)/\partial t+\vec{V}(\vec{k})\cdot\partial f(\vec{r},\vec{k},t)/\partial\vec{r}+\vec{F}\cdot\partial f(\vec{r},\vec{k},t)/\partial\vec{k}=(\partial f/\partial t)_{scatt} \tag{3}$$

其中　$\vec{F}=-e[\overrightarrow{\varepsilon_1}(\vec{r},t)+\overrightarrow{\varepsilon_0}(\vec{r}-\delta\vec{R}(\vec{r},t))]/\hbar$

$\overrightarrow{\varepsilon_1}$是加上超声场后出现的时变电场，包括了晶格形变所产生电场及电子激发后自洽势的改变，由麦克斯韦方程自洽确定。$(\partial f/\partial t)_{scatt}$是电子与杂质碰撞项。下面作弛豫时间近似，并把晶格对电子的拖曳效应及晶格畸变引起电子的局域势改变亦包括进去[8]

$$(\partial f/\partial t)_{scatt}\approx-[f(\vec{r},\vec{k},t)-\bar{f}_1]/\tau \tag{4}$$

在线性响应近似下

$$\bar{f}_1\approx f_1(\vec{r},\vec{k})-(m\vec{U}(\vec{r},t))\cdot\partial f_1(\vec{r},\vec{k})/\hbar\partial\vec{k}-(E_F^0\partial f_1(\vec{r},\vec{k})/\partial E)(2\Delta\rho(\vec{r},t)/3\rho_0)$$

τ是电子弛豫时间，ρ_0是电子平均数密度，$\Delta\rho(\vec{r},t)$是超声场引起的电子密度改变，m是电子质量。注意到分布函数只与z有关，最后可得

$$f(z,\vec{k},t)=f_1(z,\vec{k})+\int e^{ikz}f_2(k,\vec{k},t)\mathrm{d}k/2\pi \tag{5}$$

$$\begin{aligned}f_2(k,\vec{k},t)=&(\partial f_0/\partial E)[(e\overrightarrow{\varepsilon_1}(k,t)-m\vec{U}(k,t)/\tau)\cdot\vec{V}(\vec{k})-E_F^0(2\Delta\rho(k,t)/3\tau\rho_0)]/L(0)\\&+(\partial^2f_0/\partial E^2)\sum_{n\neq 0}(e\,\varepsilon_{0n}/inq_0)[(e\overrightarrow{\varepsilon_1}(k-nq_0,t)-m\vec{U}(k-nq_0,t)/\tau)\\&\cdot\vec{V}(\vec{k})-E_F^0(2\Delta\rho(k-nq_0,t)/3\tau\rho_0)]/L(n)+1/L(0)\\&\cdot\sum_{n=-\infty}^{\infty}e\varepsilon_{0n}\,\partial\Big\{(\partial f_0/\partial E)[(e\overrightarrow{\varepsilon_1}(k-nq_0,t)-m\vec{U}(k-nq_0,t)/\tau)\cdot\vec{V}(\vec{k})\\&-E_F^0(2\Delta\rho(k-nq_0,t)/3\rho_0\tau)]/L(n)\Big\}\Big/\hbar\partial K_Z+(\partial f_0/\partial E)\\&\cdot\sum_{n\neq 0}(enq_0\varepsilon_{0n}/\omega)V_z(\vec{k})\vec{e}_z\cdot\vec{U}(k-nq_0,t)/L(0)\end{aligned} \tag{6}$$

其中　$L(n)=1/\tau+i[V_z(\vec{k})(k-nq_0)-\omega]$，　$q_0=2\pi/L$。

电子电流为　$j_{e\alpha}(k,t)=-2e\int f_2(k,\vec{k},t)V_\alpha(\vec{k})\mathrm{d}\vec{k}/(2\pi)^3$

以（6）式代入，得到

$$j_{e\alpha}(k,t)=\sigma_{\alpha\beta}(k)(\varepsilon_{1\beta}(k,t)-mU_{\beta}(k,t)/e\tau)-\Delta\rho(k,t)eR_{\alpha}(k)$$

$$+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\Big\{A_{\alpha\beta}^{(n)}(k)[\varepsilon_{1\beta}(k-nq_0,t)-mU_{\beta}(k-nq_0,t)/e\tau]$$

$$-eC_{\alpha}^{(n)}(k)\Delta\rho(k-nq_0,t)\Big\}+\sum_{n=-\infty}^{\infty}B_{\alpha}^{(n)}(k)\vec{e}_z\cdot\vec{U}(k-nq_0,t) \quad (7)$$

其中α,β为方向指标，及

$$\sigma_{\alpha\beta}(k)=(\tau e^2/4\pi^3)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})V_{\beta}(\vec{k})(-\partial f_0/\partial E)/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\mathrm{d}\vec{k}$$

$$R_{\alpha}(k)=(E_F^0/6\pi^3\rho_0)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})(-\partial f_0/\partial E)/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\mathrm{d}\vec{k}$$

$$A_{\alpha\beta}^{(n)}(k)=(-\tau e^3\varepsilon_{0n}/4\pi^3inq)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})V_{\beta}(\vec{k})(\partial^2 f_0/\partial E^2)/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\mathrm{d}\vec{k}$$

$$-(e^3\tau^2\varepsilon_{0n}/4\pi^3)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\partial\Big\{(\partial f_0/\partial E)V_{\beta}(\vec{k})$$

$$/[1+i\tau(V_z(\vec{k})(k-nq_0)-w)]\Big\}/\hbar\partial K_z\mathrm{d}\vec{k}$$

$$C_{\alpha}^{(n)}(k)=(-e\,E_F^0\,\varepsilon_{0n}/i6\pi^3\rho_0 nq_0)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})(\partial^2 f_0/\partial E^2)/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\mathrm{d}\vec{k}$$

$$-E_F^0 e\tau\varepsilon_{0n}/6\pi^3\rho_0)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})/[1+i\tau(V_z(\vec{k})-w)]\Big\}\partial\Big\{(\partial f_0/\partial E)$$

$$/[1+i\tau(V_z(\vec{k})(k-nq_0)-w)]\Big\}/\hbar\partial K_z\mathrm{d}\vec{k}$$

$$B_{\alpha}^{(n)}(k)=(-nq_0\varepsilon_{0n}e^2\tau/4\pi^3)\int\Big\{V_{\alpha}(\vec{k})V_{\beta}(\vec{k})(\partial f_0/\partial E)/[1+i\tau(V_z(\vec{k})k-w)]\Big\}\mathrm{d}\vec{k}$$

显然$\sigma_{\alpha\beta}$，$A_{\alpha\beta}^{(n)}$只有对角分量，而R_{α}，$C_{\alpha}^{(n)}$，$B_{\alpha}^{(n)}$只有z分量，又由麦克斯韦方程及电荷守恒方程

$$\begin{aligned}&\nabla\times\vec{\varepsilon}=\mu_0\partial\vec{H}/\partial t && \nabla\cdot\vec{\varepsilon}=\rho_c/\epsilon_0\\ &\nabla\times\vec{H}=\vec{j}+\epsilon_0\partial\vec{\varepsilon}/\partial t && \nabla\cdot\vec{j}+\partial\rho_c/\partial t=0\end{aligned} \quad (8)$$

其中 $\vec{j}=\vec{j}_e+\rho_0\vec{U}$

ρ_c包括了晶格及电子的总电荷分布。而电场

$$\vec{\varepsilon}=\vec{\varepsilon}_1+\vec{\varepsilon}_0(z)+\partial\vec{\varepsilon}_0(z)/\partial z(\vec{e}_z\cdot\vec{U}(\vec{r},t)/iw)$$

声波在z方向传播，故有 $\nabla\times\vec{\varepsilon}_0=0$， $\nabla\times[(\vec{e}_z\cdot\vec{U})\partial\vec{\varepsilon}_0/\partial z]=0$

从而得到 $-\nabla^2\vec{\varepsilon}_{1\perp}(z,t)=-\mu_0\partial\vec{j}_{\perp}/\partial t-\mu_0\epsilon_0\partial^2\vec{\varepsilon}_{1\perp}(z,t)/\partial t^2$

$$\vec{j}_{/\!/}=-\epsilon_0\partial\vec{\varepsilon}_{1/\!/}(z,t)/\partial t-\epsilon_0(\partial\vec{\varepsilon}_0/\partial z)\vec{e}_z\cdot\partial\vec{U}(z,t)/iw\partial t$$

另一方面，由电子数守恒亦有

$$\nabla\cdot\vec{j}_{e/\!/}=e\,\partial\Delta\rho/\partial t$$

$/\!/$代表平行于声波传播方向。作富氏变换后得

$$\varepsilon_{1x,y}(k,t)=j_{x,y}(k,t)iw\mu_0/(w^2/c^2-k^2)$$

$$j_z(k,t)=i\epsilon_0 w\varepsilon_{1z}(k,t)+i\epsilon_0 q_0\sum_{n=-\infty}^{\infty}n\varepsilon_{0n}U_z(k-nq_0,t)$$

$$\Delta\rho(k,t)=-kj_{ez}(k,t)/ew \tag{9}$$

结合(7)、(9)式可解出$\vec{\varepsilon}_1,\vec{j}_e$代入(1)式便得$\bar{Q}$。

① 纵波声速只有z方向分量$\vec{U}(k,t)=U_z(k,t)\vec{e}_z$，电场及电流都只有$z$分量存在，在线性近似下可得到

$$j_{ez}(k,t)=a_L(k)U_z(k,t)+\sum_{n\neq0}b_L^{(n)}(k)U_z(k-nq_0,t) \tag{10}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1z}(k,t)=&\sigma_{zz}^{-1}(k)(1-(k/w)R_z(k))j_{ez}(k,t)+mU_z(k,t)/e\tau\\&-\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sigma_{zz}^{-1}(k)\Big\{\sigma_{zz}^{-1}(k-nq_0)(1-(k-nq_0)R_z(k-nq_0)/w)\\&\cdot A_{zz}^{(n)}(k)+(k-nq_0)C_z^{(n)}(k)/w\Big\}\times a_L(k-nq_0)U_z(k-nq_0,t)\\&-\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sigma_{zz}^{-1}(k)\,B_z^{(n)}(k)U_z(k-nq_0,t)\end{aligned} \tag{11}$$

其中　$a_L(k)=\sigma_{zz}(k)(-i\rho_0e/\epsilon_0w-m/e\tau)/(1+i\sigma_{zz}(k)/\epsilon_0w-kR_z(k)/w)$

$$\begin{aligned}b_L^{(n)}(k)=&\Big\{A_{zz}^{(n)}(k)[-i(a_L(k-nq_0)+\rho_0e)/\epsilon_0w-m/e\tau]\\&+(k-nq_0)C_z^{(n)}(k)a_L(k-nq_0)/w\Big\}/[1+i\sigma_{zz}(k)/\epsilon_0w-kR_z(k)/w]\end{aligned}$$

损耗　$$\bar{Q}=\frac{1}{2V}\int R_e(j_{ez}^*(\vec{r},t)\varepsilon_z(\vec{r},t))\mathrm{d}V \tag{12}$$

其中　$\varepsilon_z(\vec{r},t)=\varepsilon_{1z}(\vec{r},t)+\varepsilon_0(\vec{r})+(\partial\varepsilon_0/\partial z)U_z(\vec{r},t)/iw$

② 设横波的偏振方向在x，$\vec{U}(k,t)=U_x(k,t)\vec{e}_x$，显然所有量亦只有$x$分量，可得到

$$j_{ex}(k,t)=a_T(k)U_x(k,t)+\sum_{n\neq0}b_T^{(n)}(k)U_x(k-nq_0,t) \tag{13}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1x}(k,t)=&(\sigma_{xx}^{-1}(k)a_T(k)+m/e\tau)U_x(k,t)+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sigma_{xx}^{-1}(k)b_T^{(n)}(k)U_x(k-nq_0,t)\\&-\sum_{n=-\infty}^{\infty}A_{xx}^{(n)}\sigma_{xx}^{-2}(k)a_T(k-nq_0)U_x(k-nq_0,t)\end{aligned} \tag{14}$$

其中　$a_T(k)=\sigma_{xx}(k)(iw\mu_0\rho_0e-m(w^2/c^2-k^2)/e\tau)/[(w^2/c^2-k^2)-iw\mu_0\sigma_{xx}(k)]$

$$\begin{aligned}b_T^{(n)}(k)=&A_{xx}^{(n)}(k)[iw\mu_0(a_T(k)+\rho_0e)-m(w^2/c^2-k^2)/e\tau]/[(w^2/c^2-k^2)\\&-iw\mu_0\sigma_{xx}(k)]\end{aligned}$$

损耗　$$\bar{Q}=\int R_e(j_{ex}^*(\vec{r},t)\varepsilon_{1x}(\vec{r},t))\mathrm{d}V/2V \tag{15}$$

3 结　　果

求解玻尔兹曼方程时，利用了绝热跟随的弛豫时间近似，这要求 $\sigma_0/E_0w\gg1$，$iw\mu_0\sigma_0/[w^2/c^2-k^2]\gg1$，这个条件通常能满足。而且由于CMS是重掺杂，还有$\tau w\ll1$。

这样　$a_L(k)\approx-\rho_0e$　　$b_L^{(n)}(k)\approx0$

$a_T(k)\approx-\rho_0e$　　$b_T^{(n)}(k)\approx0$

CMS中A组份调制函数为 $f(z)=e+g\sin q_0z$，则内电场在$g\ll1$时有

$$\vec{\varepsilon}_0(z)\approx[-g(E_F^A-E_F^B)/e]q_0\cos q_0z\,\vec{e}_z$$

经过运算，可以得到下面结果。

3.1 长波限$q/q_0\ll1$

当声波波长远大于CMS调制周期，则声速近似有下面形式[4]

$$U_{x,z}(z)=U_0e^{iqz}[1+ia(q/q_0)\cos q_0z+aq^2/[q_0^2-4q^2]\sin q_0z]$$

a反映弹性参数出现周期性调制，如果A材料原子间互作用强于B材料原子间互作用，$a>0$。在$q/q_0\ll1$极限下，自由程l与声波波长之比亦远小于1，$ql\ll1$。

纵波　$$\bar{Q}\approx(|U_0|^2\rho_0m/2\tau)(4/15+2a^2/15+19g(E_F^A-E_F^B)a/2E_F^0)q^2l^2 \tag{16}$$

其中4/15这一项是均匀材料的结果。

横波　$$\bar{Q}\approx(|U_0|^2\rho_0m/2\tau)(1/5+a^2/10+5g(E_F^A-E_F^B)a/2E_F^0)q^2l^2 \tag{17}$$

其中1/5这一项是均匀材料的结果。在上面两个表达式中，后面两项是弹性参数及电子密度周期性变化而出现的修正项，注意到第三项，如果a与$(E_F^A-E_F^B)$符号相同，超声损耗增加；如果相反则超声损耗减少。

3.2 短波限$(q/q_0)\gg1$

在$(q/q_0)\gg1$，CMS中超声场[4]

$$U_{x,z}(z)=U_0[1+(a/4)(i\cos q_0z-\frac{q_0}{q}\sin q_0z)]e^{iqz}$$

一般说来，在这种情况下亦有$l\sim\lambda$，即$ql>1$。

纵波　$$\bar{Q}=(|U_0|^2\rho_0m/2\tau)\{(1+a^2/32)\pi ql/6-\pi^2g[(E_F^A-E_F^B)a/(48E_F^0)]q_0l\} \tag{18}$$

横波　$$\bar{Q}=(|U_0|^2\rho_0m/2\tau)\{4(1+a^2/32)ql/3\pi-g[(E_F^A-E_F^B)a/(6\pi E_F^0)]q_0l\} \tag{19}$$

电荷密度调制的贡献与频率无关。

参 考 文 献

〔1〕 Schuller I K et al., *Microstructure Science and Engineering*, 1981

〔2〕 Goins A et al., *Phys.Rev.B*, 25 (1982), 7544

〔3〕 熊诗杰等，物理学报 32 (1983), 1073

〔4〕 Zou Nanzhi et al., *Chinese Phys.Lett.*, 1 (1984),77; *Commun.in Theor. Phys.*,4 (1985),157

〔5〕 Cohen M H et al., *Phys. Rev.*, 117 (1964),937

〔6〕 Pipard A B, *Phil.Mag.*, 46 (1955),1104

〔7〕 郝柏林等，统计物理学进展，科学出版社，1981

〔8〕 Holstein T, *Phys.Rev.*, 13 (1959),479

Ultrasonic Attenuation Caused by Electron Relaxation in Compositional Modulated Structure

*Zou Nanzhi**

Abstract

Ultrasonic attenuation caused by electron relaxation in metal compositional modulated structure was calculated by using Boltzman equation. The effect of electron density modulation and acoustic modulation on ultrasonic attenuation was discussed.

Keywords compositional modulated structure, ultrasonic attenuation, modulation of electron density

* Research Institute of Material Science