

СДВИГ И ЗАТУХАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ ВСЛЕДСТВИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ЭЛЕКТРОНАМИ

Л. А. Фальковский*

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау Российской академии наук
117337, Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 марта 2002 г.

Вычислены сдвиг частоты и затухание длинноволновых оптических фононов под влиянием взаимодействия с электронами. Рассмотрены уравнения динамической теории упругости совместно с уравнениями Максвелла и кинетическим уравнением для определения поля деформации, электрического поля и функции распределения электронов. Изменение спектра электронов описано с помощью локального потенциала. Учтена кулоновская экранировка продольного электрического поля.

PACS: 63.20.-e, 78.30.-j

1. ВВЕДЕНИЕ

В одной из первых работ, в которой методы теории поля были использованы в физике конденсированного состояния, Мигдал [1] вычислил перенормировку электронного и фононного спектров в металлах, обусловленную электрон-фононным взаимодействием. Он нашел, что поправка к вершинной части является малой по адиабатическому параметру («теорема Мигдала»). Однако он пришел к выводу о том, что перенормировка фононного спектра существенна. А именно, скорость акустических фононов должна была бы изменяться по порядку величины: $\tilde{s} = s\sqrt{1-2\lambda}$, где λ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. Отсюда видно, что в результате взаимодействия с электронами следует ожидать существенного смягчения акустической моды, а при $\lambda \rightarrow 1/2$ электрон-фононная система оказывается неустойчивой. Этот результат противоречит представлениям об адиабатичности электрон-фононной системы (см., например, [2]), согласно которым легкие электроны должны следить за относительно медленным колебанием решетки. Поэтому изменение фононного спектра должно быть малым по адиабатическому параметру $\sqrt{m/M}$, где m и M — соответственно массы электрона и иона.

В то же время в работах Ахиезера, Силина, Гуревича, Конторовича и др. (см. обзор [3]) на осно-

ве кинетического уравнения вычислялось затухание звука в металлах. Было показано, что влияние электрон-фононного взаимодействия действительно определяется адиабатическим параметром. Для фононов с волновым вектором k и частотой $\omega_k = sk$ изменение скорости звука δs и затухание Γ описываются формулами

$$\frac{\delta s}{s} - i \frac{\Gamma}{\omega_k} = \lambda \begin{cases} \frac{s^2}{v_F^2} - i \frac{\pi s}{2v_F}, & kv_F > |\omega_k + i\gamma|, \\ \frac{\omega_k}{\omega_k + i\gamma}, & kv_F < |\omega_k + i\gamma|, \end{cases} \quad (1)$$

где γ — частота электронных столкновений, константа связи с фононами, $\lambda = \zeta_{ik}^2 \nu_0 / \rho s^2$, пропорциональна плотности электронных состояний ν_0 на ферми-поверхности (для изотропного случая $\nu_0 = m^* p_F / \pi^2$, m^* — эффективная масса электронов), ρ — плотность металла. Деформационный потенциал ζ_{ik} описывает локальное изменение спектра электронов под влиянием деформации

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \zeta_{ik}(\mathbf{p}) u_{ik}(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где u_{ik} — тензор деформации. Выражения (1) дают правильный ответ в различных предельных режимах: для поглощения звука в гидродинамическом пределе ($\omega_k \ll \gamma$ и $k \rightarrow 0$), для поглощения нулевого звука ($\omega_k \gg \gamma$ и $k \rightarrow 0$), а также для затухания Ландау в баллистическом режиме ($kv_F \gg |\omega_k + i\gamma|$). В последнем случае явно видно, что в противоречии с

*E-mail: falk@itp.ac.ru

результатом Мигдала сдвиг скорости звука и затухание малы по адиабатическому параметру, поскольку $s/v_F \sim \sqrt{m/M}$.

Это противоречие было разрешено в работе Бровмана и Кагана [4] (см. также работу Гейликмана [5]). Они продемонстрировали ограниченность модели Фрëлиха, дающей аномально большую перенормировку фононов, и показали, что во втором порядке теории возмущений по электрон-фононному взаимодействию происходит компенсация двух больших слагаемых, так что остающийся вклад оказывается малым в соответствии с адиабатическим приближением. Эта компенсация может быть формально учтена путем вычитания $\Pi(\omega, k) - \Pi(0, k)$ из собственно-энергетической фононной части ее значения при нулевой частоте.

Большие перенормировки были получены и для спектра оптических фононов Энгельсбергом и Шриффером [6], которые использовали результаты Мигдала применительно к бездисперсионным оптическим фононам. Позже Ипатова и Субашиев [7] рассматривали спектр оптических фононов в бесстолкновительном режиме и показали, что вычитание, сделанное в работе [4], следует выполнять и в этом случае. Тем не менее недавно Александров и Шриффер вновь получили [8] с помощью диаграммной техники огромную дисперсию оптических фононов, $\omega_k = \omega_0 + \lambda v_F^2 k^2 / 3\omega_0$, определяемую скоростью Ферми, что противоречит адиабатическому приближению. Следует отметить, что обычная величина дисперсии оптических фононов имеет порядок скорости звука. В недавней работе Райзер [9] несколько исправил положение, рассмотрев экранировку дальнедействующего электрического поля, возникающего при продольных оптических колебаниях¹⁾. Большая дисперсия исчезла, но электрон-фононное взаимодействие вошло в результат нефизическим образом. В работах [6–9] не учитывались столкновения в фононной и электронной системах и полностью игнорировалось затухание оптических фононов, обусловленное как электрон-фононным взаимодействием, так и кулоновской экранировкой.

В данной работе мы рассматриваем влияние электрон-фононного взаимодействия и кулоновской экранировки на спектр оптических фононов, обращая особое внимание на появляющееся при этом затухание фононов. Мы следуем методу кинетического уравнения, применявшемуся ранее к акусти-

ческим фононам [3] и в задачах о поверхностных оптических фононах [11].

2. ВКЛАД ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КИНЕТИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ

В случае оптических фононов известны два типа электрон-фононного взаимодействия. Во-первых, взаимодействие типа Фрëлиха, которое определяется поляризацией, возникающей при относительном смещении \mathbf{u} ионных подрешеток. Рассмотрим для простоты кубический кристалл с двумя атомами в элементарной ячейке, когда существуют три оптические ветви. Тогда локальное изменение электронно-го спектра можно записать в виде

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \zeta(\mathbf{p}) \operatorname{div} \mathbf{u}(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

где $\zeta(\mathbf{p})$ — скалярная функция электронного импульса. Взаимодействие этого типа стремится к нулю в длинноволновом пределе подобно выражению (2). Во-вторых, может существовать и взаимодействие, обусловленное непосредственно оптическим сдвигом подрешеток и не исчезающее в длинноволновом пределе:

$$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = \varepsilon_0(\mathbf{p}, t) + \zeta_i(\mathbf{p}) u_i(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

где константа связи $\zeta_i(\mathbf{p})$ является векторной функцией. Существенное различие этих двух типов заключается в том, что в случае (3) лишь продольная фононная мода взаимодействует с электронами. Поэтому будем считать, что волновой вектор \mathbf{k} фонона направлен вдоль оси симметрии (в дальнейшем ось z) так, чтобы продольная и поперечные моды разделялись, и рассмотрим сначала случай поляризационного взаимодействия (3).

Решение кинетического уравнения для электронной функции распределения ищем в виде $f_0[\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)] + \delta f_p(\mathbf{r}, t)$, где равновесная функция распределения f_0 зависит от локального значения энергии. Такая равновесная функция обращает в нуль интеграл столкновений. Значение химического потенциала выбирается при этом так, чтобы в локальном равновесии не менялась плотность электронного заряда. Как легко видеть, это требование приводит к переопределению константы связи с фононами, $\zeta(\mathbf{p}) \rightarrow \zeta(\mathbf{p}) - \langle \zeta(\mathbf{p}) \rangle$, где угловые скобки означают усреднение по ферми-поверхности:

$$\langle \dots \rangle = \frac{1}{\nu_0} \int (\dots) \frac{2 dS_F}{v(2\pi)^3},$$

¹⁾ По-видимому, впервые кулоновская экранировка оптических фононов рассматривалась в работе [10].

Таким образом, среднее значение перенормированной константы связи обращается в нуль:

$$\langle \zeta(\mathbf{p}) \rangle = 0. \quad (5)$$

Уравнение для фурье-компоненты неравновесной добавки к функции распределения можно записать в виде

$$-i(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \delta f_p(\mathbf{k}, \omega) + \gamma [\delta f_p(\mathbf{k}, \omega) - \langle \delta f_p(\mathbf{k}, \omega) \rangle] = -\psi_p(\mathbf{k}, \omega) \frac{df_0}{d\varepsilon}, \quad (6)$$

где введено обозначение

$$\psi_p(\mathbf{k}, \omega) = \omega \zeta(\mathbf{p}) \mathbf{k} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{k}, \omega) + e \mathbf{v} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega). \quad (7)$$

Мы используем приближение времени релаксации, которое справедливо для рассеяния электронов на дефектах, а также для электрон-фононного рассеяния при температурах выше дебаевской, когда его можно считать упругим. Электрическое поле \mathbf{E} , сопровождающее оптические колебания, является неизвестной функцией и наряду с оптическим смещением должно определяться путем совместного решения уравнений, которые мы выпишем ниже. Добавку к функции распределения ищем в виде

$$\delta f_p(\mathbf{k}, \omega) = -\chi_p(\mathbf{k}, \omega) \frac{df_0}{d\varepsilon}.$$

Решая уравнение (6), находим

$$\chi_p(\mathbf{k}, \omega) = i[\psi_p(\mathbf{k}, \omega) + \gamma \langle \chi_p(\mathbf{k}, \omega) \rangle] / \Delta_p(\mathbf{k}), \quad (8)$$

где

$$\langle \chi_p(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \frac{i \langle \psi_p(\mathbf{k}, \omega) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{1 - i \langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \quad (9)$$

и мы ввели обозначение

$$\Delta_p(\mathbf{k}) = \omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i\gamma. \quad (10)$$

Полученное решение кинетического уравнения мы используем для того, чтобы определить электрическое поле и оптическое смещение.

3. УРАВНЕНИЕ МАКСВЕЛЛА ДЛЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Из уравнений Максвелла электрическое поле \mathbf{E} может быть выражено через поляризацию \mathbf{P} :

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{4\pi[\mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}) - \omega^2 \mathbf{P} / c^2]}{k^2 - \omega^2 / c^2}. \quad (11)$$

Частота ω , которая нас интересует, имеет порядок частоты оптических фононов, т.е. 10^2 см^{-1} , а волновой вектор k фонона, если он возбуждается светом, равен по порядку величины волновому вектору света (в рамановском рассеянии он определяется переданным импульсом), что составляет 10^5 см^{-1} . Это означает, что выполнено условие $k \gg \omega/c$; область, где это условие нарушается, называется поляритонной. Тогда следует пренебречь в (11) членами с c^2 , после чего связь поля с поляризацией приобретает простой вид:

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -4\pi \mathbf{k}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}) / k^2. \quad (12)$$

Отсюда видно, что электрическое поле является продольным и существенна лишь продольная компонента поляризации P_z .

В электрическую поляризацию

$$P_z = NZ u_z(\mathbf{k}, \omega) + \alpha E(\mathbf{k}, \omega) + \frac{ie}{k} \int \frac{2 d^3 p}{(2\pi)^3} \delta f_p(\mathbf{k}, \omega) \quad (13)$$

вносят вклад, во-первых, дипольный момент, связанный с оптическим смещением (N — число элементарных ячеек в единице объема, Z — эффективный заряд иона), во-вторых, поляризация α заполненных электронных оболочек и, наконец, вклад \mathbf{P}_e свободных носителей, определяемый плотностью их заряда $\rho_e = -i\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_e$. С помощью выражения (13) и решения кинетического уравнения (8), (9) уравнение Максвелла (12) можно привести к виду

$$\varepsilon_e(k, \omega) E(\mathbf{k}, \omega) = -4\pi \beta_{fd}(k, \omega) u_z(\mathbf{k}, \omega), \quad (14)$$

где электронный вклад в проницаемость

$$\varepsilon_e(k, \omega) = \varepsilon_\infty - \frac{4\pi e^2 \nu_0 \langle v_z / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{k(1 - i \langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle)} \quad (15)$$

и высокочастотная проницаемость $\varepsilon_\infty = 1 + 4\pi\alpha$.

Введенная нами функция

$$\beta_{fd}(k, \omega) = NZ - e\omega \nu_0 \frac{\langle \zeta(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{1 - i \langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \quad (16)$$

представляет собой кулоновский отклик продольных оптических фононов.

4. УРАВНЕНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДЛЯ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ

Уравнение движения в длинноволновом приближении для взаимодействия (3) может быть записано

в виде

$$(\omega_k^2 - \omega^2)u_j(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z}{M'}E_j(\mathbf{k}, \omega) + \frac{ik_j}{M'N} \int \frac{2d^3p}{(2\pi)^3} \zeta(\mathbf{p}) \delta f_p(\mathbf{k}, \omega), \quad (17)$$

где M' — приведенная масса двух атомов в элементарной ячейке. Будем считать известной фононную частоту ω_k , которая должна вычисляться в отсутствие электрического поля E и в пренебрежении всеми неадиабатическими поправками. В длинноволновом приближении ее можно записать в виде $\omega_k^2 = \omega_0^2 \pm s^2 k^2$, где s имеет порядок обычной скорости звука в металлах, а знак соответствует максимуму или минимуму фононной ветви. Кроме того, надо помнить, что у оптических фононов всегда имеется затухание $\Gamma^{nat} \approx \sqrt{m/M}$, которое определяется ангармоническими процессами распада на два фонона и более. Его можно добавить к ω_k в виде $-i\Gamma^{nat}/2$.

Первый член в правой части уравнения (17) представляет собой силу, действующую со стороны электрического поля на возникающий при оптических колебаниях дипольный момент элементарной ячейки, а последнее слагаемое — вынуждающая сила со стороны электронов проводимости, появляющаяся вследствие отклонения от условий адиабатичности. Важно, что в соответствии с концепцией адиабатического приближения локально-равновесное значение функции распределения не вносит вклада в эту силу. Поскольку рассматриваемая задача по существу является классической, выражение для вынуждающей силы может быть получено формально из лагранжиана электрон-фононной системы с учетом взаимодействия (3), при этом волновой вектор k_j возникает в результате интегрирования по частям.

Используя решение кинетического уравнения (8), (9), мы можем переписать уравнение движения (17) в виде

$$(\tilde{\omega}^2 - \omega^2)u_z(\mathbf{k}, \omega) = \tilde{Z}E(\mathbf{k}, \omega)/M', \quad (18)$$

где введены перенормированные частота фононов

$$\tilde{\omega}^2 = \omega_k^2 + \frac{\nu_0 \omega k^2}{M'N} \left(\left\langle \frac{\zeta^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle + \frac{i\gamma \langle \zeta(\mathbf{p})/\Delta_p(\mathbf{k}) \rangle^2}{1 - i\langle \gamma/\Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \right) \quad (19)$$

и эффективный заряд ионов

$$\tilde{Z} = Z - \frac{e\nu_0 k}{N} \times \left(\left\langle \frac{\zeta(\mathbf{p})v_z}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle + i\gamma \frac{\langle v_z/\Delta_p(\mathbf{k}) \rangle \langle \zeta(\mathbf{p})/\Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{1 - i\langle \gamma/\Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \right). \quad (20)$$

С помощью определения (10) и условия (5) находим

$$\tilde{Z} = \beta_{fd}(k, \omega)/N, \quad (21)$$

что позволяет переписать выражение для диэлектрической проницаемости электрон-фононной системы в окончательном виде:

$$\varepsilon(k, \omega) = \varepsilon_e(k, \omega) + 4\pi N \tilde{Z}^2 / M' (\tilde{\omega}^2 - \omega^2). \quad (22)$$

Выражение (22) имеет прозрачный физический смысл: к электронной восприимчивости добавляется вклад оптических смещений, определяемый перенормированными (вследствие электрон-фононного взаимодействия) эффективным ионным зарядом и частотой оптических колебаний.

5. СДВИГ И ЗАТУХАНИЕ ПРОДОЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ МОДЫ

Формула (15) дает известные предельные выражения для диэлектрической проницаемости металла:

$$\varepsilon_e(k, \omega) - \varepsilon_\infty = \begin{cases} -\varepsilon_\infty \omega_{pe}^2 / \omega(\omega + i\gamma), & kv_F < |\omega + i\gamma|, \\ \varepsilon_\infty (k_0/k)^2 (1 + i\pi\omega/2kv_F), & kv_F > |\omega + i\gamma|, \end{cases} \quad (23)$$

где ε_∞ — высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Здесь первая формула представляет зависящую от частоты друдевскую проводимость, а плазменная частота электронов дается интегралом по ферми-поверхности:

$$\omega_{pe}^2 = \frac{e^2}{3\pi^2 \varepsilon_\infty} \int v dS_F.$$

Вторая формула описывает длинноволновый предел дебаевской экранировки, и мы удерживаем здесь относительно малое мнимое слагаемое. Параметр экранировки $k_0^2 = 4\pi e^2 \nu_0 / \varepsilon_\infty$.

Частота продольной моды $\omega = \omega_{LO}$ определяется условием $\varepsilon(k, \omega) = 0$, т. е.

$$\omega^2 = \tilde{\omega}^2 + 4\pi N \tilde{Z}^2 / M' \varepsilon_e(k, \omega). \quad (24)$$

На частотах порядка частоты фононных колебаний и для $k \ll k_0$ электронная проницаемость велика — отношение фононной частоты ω к электронной плазменной частоте в металлах содержит тот же адиабатический параметр: $\omega_0/\omega_{pe} \sim \sqrt{m/M}$, и уравнение (24) можно решить итерациями. В первом при-

ближении получаем частоту и затухание продольной оптической моды:

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma &= \\ &= \omega_k^2 + \frac{k^2\omega_k\nu_0}{M'N} \left\langle \frac{\zeta^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle + \frac{\omega_{pi}^2\varepsilon_\infty}{\varepsilon_e(k, \omega_k)}, \end{aligned} \quad (25)$$

где $\omega_{pi}^2 = 4\pi N Z^2 / \varepsilon_\infty M'$ — квадрат плазменной частоты ионов, $\omega_{pi} \sim \omega_0$.

В отсутствие свободных электронов плотность состояний $\nu_0 = 0$ и формула (24) дает частоту продольной моды: $\omega_{LO}^2 = \omega_k^2 + \omega_{pi}^2$. На поперечную моду электрическое поле не влияет: $\omega_{TO}^2 = \omega_k^2$. Если оба атома в ячейке одинаковы, то следует положить $Z = 0$, и частота продольной моды в центре зоны Бриллюэна совпадает с частотой поперечных мод — различие, за которым мы здесь не следим, появляется лишь в дисперсии.

В случае, когда носители присутствуют, формула (25) позволяет получать предельные выражения для малых и больших значений параметра $\kappa = kv_F / |\omega_k + i\gamma|$. Для малых значений этого параметра, вынося $\Delta_p(\mathbf{k} = 0)$ за скобки и пользуясь соответствующей асимптотикой $\varepsilon_e(k, \omega)$ из формулы (23), получаем

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma &= \omega_k^2 - \omega_k(\omega_k + i\gamma) \left(\frac{\omega_{pi}}{\omega_{pe}} \right)^2 + \\ &+ \frac{\lambda\omega_k}{\omega_k + i\gamma} (sk)^2, \quad \kappa \ll 1, \end{aligned} \quad (26)$$

где безразмерная константа связи определена равенством $\lambda = \langle \zeta^2(\mathbf{p}) \rangle \nu_0 / M' N s^2$. Выражение для плотности электронных состояний в изотропном случае, ν_0 , содержит множитель $ap_F m^* / m$, учитывающий размер поверхности Ферми и эффективную массу (a — параметр решетки).

В обратном предельном случае диэлектрическая проницаемость определяется второй из формул (23), а главный, чисто мнимый, вклад электрон-фононного взаимодействия дается интегралом по пояску на ферми-поверхности, на котором $v_z = 0$:

$$\nu_0 \left\langle \frac{\zeta^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle = -i\pi \int \frac{2dS_F}{v(2\pi)^3} \zeta^2(\mathbf{p}) \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}),$$

где $\delta(x)$ — функция Дирака. Вводя некоторую среднюю скорость v_F на этом пояске, интеграл можно выразить через безразмерную константу связи λ , положив

$$\frac{\nu_0 \langle \zeta^2(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{M' N} = -\frac{i\pi s^2 \lambda}{2kv_F}.$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma &= \omega_k^2 - i\frac{\pi\omega_k s^2 k}{2v_F} \left(\lambda + \frac{\omega_{pi}^2}{s^2 k_0^2} \right) + \\ &+ \left(\frac{\omega_{pi} k}{k_0} \right)^2, \quad \kappa \gg 1. \end{aligned} \quad (27)$$

Заметим, что в изотропном случае входящее в (26), (27) значение λ обращается в нуль благодаря условию (5).

Таким образом, в присутствии свободных электронов частота продольных фононов существенно меньше — на величину ω_{pi} , чем соответствующая частота для диэлектрика. Это результат кулоновской экранировки. Кроме того, появляются дополнительные смягчение, уширение и дисперсия (26), малые по адиабатическому параметру. Наиболее существенное изменение — возникновение в предельном случае (27) положительной дисперсии, не зависящей от константы электрон-фононного взаимодействия. Поскольку $\omega_{pi}^2 / k_0^2 \approx s^2$, эта дисперсия имеет разумную величину, определяемую по порядку величины скоростью звука. При $Z = 0$ это слагаемое отсутствует, но существует (не выписанный нами) вклад порядка m/M того же происхождения, что и сдвиг в первой формуле (1).

Другое существенное изменение — дополнительное затухание (члены в скобках выражения (27)). Это затухание, хотя и содержит малый адиабатический параметр $s/v_F \sim \sqrt{m/M}$, оказывается сравнимым с естественным затуханием Γ^{nat} . Отметим, что здесь член с λ (электрон-фононное взаимодействие) сравним с членом, происходящим от кулоновской экранировки.

6. СЛУЧАЙ ДЕФОРМАЦИОННОГО ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Ответ на вопрос о том, какое из взаимодействий, (3) или (4), реализуется в действительности, должен дать эксперимент. В принципе, оба возможны, но в случае (4) поперечные моды не взаимодействуют со свободными носителями. Приведем здесь результаты для деформационного взаимодействия (4).

В кинетическом уравнении (6) меняется функция ψ_p :

$$\psi_p(\mathbf{k}, \omega) = -i\omega\zeta_i(\mathbf{p})u_i(\mathbf{k}, \omega) + e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}.$$

Изменяются правая часть уравнений движения [10]

$$(\omega_k^2 - \omega^2)u_i(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z}{M'}E_i - \frac{1}{M'N} \int \frac{2 d^3p}{(2\pi)^3} \zeta_i(\mathbf{p}) \delta f_p(\mathbf{k}, \omega) \quad (28)$$

и функция отклика

$$\beta_{fd}(k, \omega) = NZ + \frac{i\epsilon\nu_0 \langle \zeta(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{k(1 - i\langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle)} \quad (29)$$

продольной оптической моды (ср. с выражением (16)). Для продольной моды вместо уравнения (19) имеем

$$\tilde{\omega}^2 = \omega_k^2 + \frac{\nu_0\omega}{M'N} \left(\left\langle \frac{\zeta_z^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle + i\gamma \frac{\langle \zeta_z(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle^2}{1 - i\langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \right). \quad (30)$$

Эффективный перенормированный заряд \tilde{Z} в (18) теперь равен

$$\tilde{Z} = Z - \frac{i\epsilon\nu_0}{N} \left(\left\langle \frac{\zeta_z(\mathbf{p})v_z}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle + i\gamma \frac{\langle v_z / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle \langle \zeta_z(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{1 - i\langle \gamma / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle} \right). \quad (31)$$

Это выражение, как легко увидеть с помощью (10) и условия типа (5), отличается от β_{fd}/N лишь знаком перед вторым слагаемым в (29).

Подставив в уравнение движения для продольной моды,

$$\left(\tilde{\omega}^2 - \omega^2 + \frac{4\pi\beta_{fd}(k, \omega)\tilde{Z}}{M'\epsilon_e(k, \omega)} \right) u_z(\mathbf{k}, \omega) = 0, \quad (32)$$

выражения (29)–(31) и приводя члены в скобках к общему знаменателю, видим, что большие «адиабатические» слагаемые сокращаются благодаря векторному характеру взаимодействия (4). Результат для частоты можно представить в виде

$$\omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma = \omega_k^2 + \left(\omega_{pi}^2 + \frac{\omega\nu_0}{M'N} \left\langle \frac{\zeta_z^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle \right) \frac{\epsilon_\infty}{\epsilon_e(k, \omega)}. \quad (33)$$

В колебаниях поперечных мод электрическое поле не участвует, и выражение для их частоты и затухания получается непосредственно из формулы (30):

$$\tilde{\omega}_{TO}^2 - i\omega_{TO}\Gamma = \omega_k^2 + \frac{\nu_0\omega_k}{M'N} \left\langle \frac{\zeta_x^2(\mathbf{p})}{\Delta_p(\mathbf{k})} \right\rangle, \quad (34)$$

где ось x выбрана перпендикулярно направлению \mathbf{k} распространения фонона.

С помощью (33) и (34) находим частоту и затухание мод в пределах малых и больших значений параметра $\kappa = kv_F/|\omega_k + i\gamma|$

1) Для поперечной моды в длинноволновой области

$$\omega_{TO}^2 - i\omega_{TO}\Gamma = \omega_k^2 + \lambda\omega_0^2 \frac{\omega_k}{\omega_k + i\gamma}, \quad \kappa \ll 1, \quad (35)$$

где безразмерная константа λ определена соотношением

$$\frac{\nu_0 \langle \zeta_x^2(\mathbf{p}) / \Delta_p(\mathbf{k}) \rangle}{M'N} = \lambda\omega_0^2,$$

а в коротковолновой области

$$\begin{aligned} \omega_{TO}^2 - i\omega_{TO}\Gamma &= \\ &= \omega_k^2 + \lambda\omega_0^2 \frac{\omega_k}{kv_F} \left(\frac{\omega_k}{kv_F} - i\frac{\pi}{2} \right), \quad \kappa \gg 1, \end{aligned} \quad (36)$$

и λ возникает теперь при интегрировании по пояску на ферми-поверхности, на котором $v_z = 0$,

$$\frac{1}{M'N} \int \frac{2 dS_F}{v(2\pi)^3} \frac{\zeta_x^2(\mathbf{p})}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\gamma} = \lambda \frac{\omega_0^2}{kv_F} \left(\frac{\omega_k}{kv_F} - i\frac{\pi}{2} \right).$$

2) Для продольной моды

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma &= \\ &= \omega_k^2 - (\lambda\omega_0^2 + \omega_{pi}^2) \frac{\omega_k^2}{\omega_{pe}^2} - i\gamma\omega_k \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_{pe}^2}, \quad \kappa \ll 1, \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \omega_{LO}^2 - i\omega_{LO}\Gamma &= \omega_k^2 - \lambda\omega_k(\omega_k + i\gamma) \frac{\omega_0^2}{(v_F k_0)^2} + \\ &+ \left(1 - i\frac{\pi\omega_k}{2kv_F} \right) \frac{\omega_{pi}^2}{k_0^2} k^2, \quad \kappa \gg 1. \end{aligned} \quad (38)$$

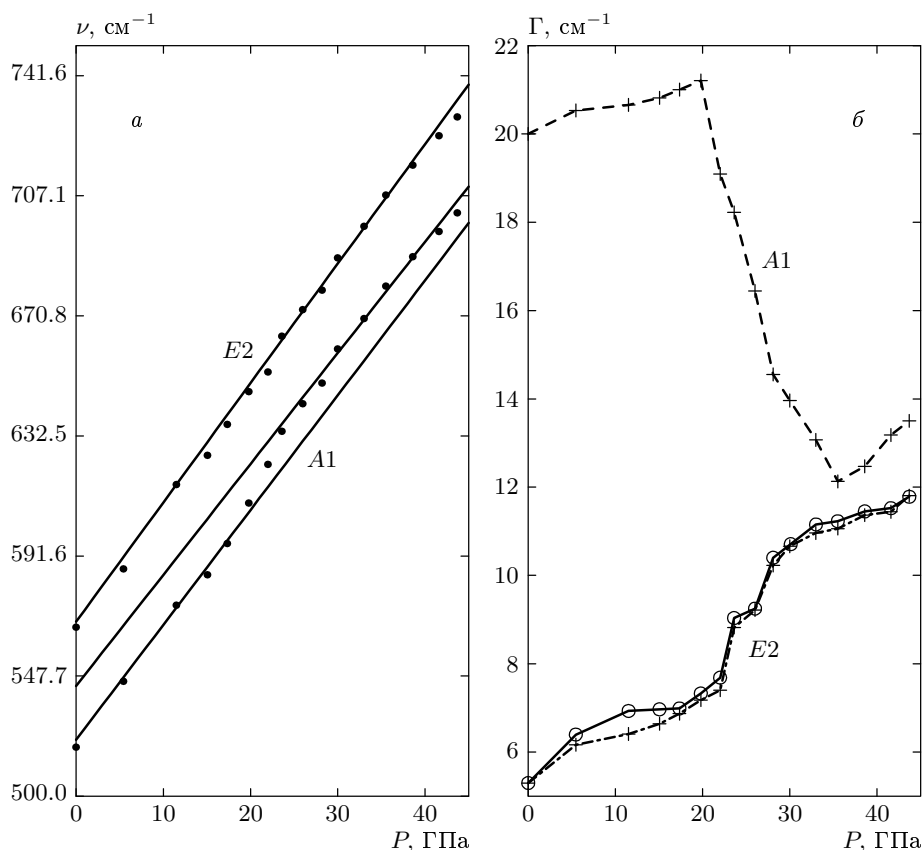
В последнем случае константа λ введена соотношением

$$\frac{1}{M'N} \int \frac{2 dS_F}{v(2\pi)^3} \frac{\zeta_z^2(\mathbf{p})}{v_z^2} = \lambda \frac{\omega_0^2}{v_F^2}.$$

Заметим, что все использованные нами определения константы электрон-фононного взаимодействия λ дают безразмерное значение порядка единицы для типичного металла. Вариация величины λ возможна из-за изменения плотности электронных состояний ν_0 .

7. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Выделим прежде всего результаты, не зависящие от модели электрон-фононного взаимодействия, т. е.



Изменение частоты (а, квадратичная шкала) и ширины (б) для поперечной E2 и продольной A1 фононных мод в GaN под давлением. Прямые — линейная интерполяция, для A1 имеются две прямые соответственно для областей ниже и выше 23 ГПа. Резкие изменения при 23 ГПа объясняются переходом металл–диэлектрик

не содержащие константу λ . Это, во-первых, смягчение продольной оптической фононной моды на величину ω_{pi} по сравнению с ее значением в отсутствие свободных носителей и дополнительное уменьшение квадрата частоты $(\omega_k \omega_{pi} / \omega_{pe})^2$ (см. (26) и (37)) в области малых k . Во-вторых, появление у той же моды положительной дисперсии типа $(\omega_{pi} k / k_0)^2 \approx (sk)^2$ (см. (27) и (38)) в области больших k . В-третьих, неадиабатическое затухание, которое дают носители в той же области значений k . Все эти результаты — эффект кулоновской экранировки свободными носителями электрического поля, сопровождающего колебания дипольной решетки. Они могут быть получены, если записать диэлектрическую проницаемость просто в виде суммы ионного и электронного вкладов и воспользоваться для нее известными предельными выражениями (23).

Кроме того, поправки вносит и электрон-фононное взаимодействие — слагаемые с λ и частотой столкновений γ , учитывающей вклад элект-

трон-фононного рассеяния в проводимость. Разумеется, эти поправки зависят от вида взаимодействия. Они увеличивают затухание продольной моды в случае поляризационного взаимодействия (27) — для деформационного взаимодействия соответствующее слагаемое в (38) содержит лишнюю степень адиабатического параметра $\sqrt{m/M}$.

Для поперечных мод характер взаимодействия существен. Поляризационное взаимодействие не оказывает на них никакого влияния, а деформационное взаимодействие (35) и (36) увеличивает частоту моды и вносит дополнительное затухание аналогично тому, как это происходит в случае акустических мод (1) — различие связано лишь с видом спектра ω_k , который теперь описывает оптические фононы.

Заметим, что для выяснения роли электрон-фононного взаимодействия наиболее интересна область (27), где его вклад в затухание конкурирует с экранировкой (слагаемые в скобках). В рамановских экспериментах волновой вектор фонона

определяется волновым вектором $k \sim \omega^{in}/c$ падающего лазерного пучка частоты ω^{in} , и параметр $\kappa = kv_F/|\omega_0 + i\gamma| \approx 0.3$, если $\omega^{in} \sim 10^4$ К и частота возбуждаемого в центре зоны Бриллюэна фонона $\omega_0 \sim 10^2$ К, а типичное значение скорости Ферми $v_F \sim 10^8$ см/с. Поэтому для измерения λ предпочтительны более высокие частоты падающего лазерного пучка.

Поскольку экспериментальная информация о влиянии свободных электронов на затухание оптических фононов в металлах отсутствует, приведем данные [12], касающиеся легированного GaN. Под давлением в нем вследствие движения электронных зон при 23 ГПа происходит переход металл-диэлектрик, причем плотность свободных носителей существенно уменьшается с $5 \cdot 10^{19}$ см⁻³ до величины, определяемой концентрацией дефектов с неглубокими уровнями. На рисунке, взятом из работы [13], показана зависимость частоты и ширины двух фононных (поперечной E2 и продольной A1) мод. Видно, что помимо монотонного увеличения частоты и ширины обеих мод с давлением при 23 ГПа у продольной моды резко увеличивается частота и уменьшается ширина, в то время как для поперечной моды это давление явно не выделено. Описанные изменения определенно свидетельствуют в пользу поляризационного характера электрон-фононного взаимодействия в GaN. Скачок в затухании позволяет с помощью (26) оценить частоту столкновений: $\gamma = 3.5 \cdot 10^{14}$ с⁻¹. Воспользовавшись известным значением эффективной массы $m^* = 0.2m$, получаем подвижность $\mu = 25$ см²/с·В, что соответствует экспериментальным данным о проводимости.

Автор признателен Е. Ж. Мищенко за обсуждение работы. Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 01-02-16211) и программы

Министерства промышленности, науки и технологий РФ «Исследование коллективных и квантовых эффектов в конденсированных средах».

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **34**, 1438 (1958).
2. М. Борн, Х. Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток*, Изд-во иностр. лит., Москва (1958), гл. 4.
3. В. М. Конторович, УФН **142**, 265 (1984).
4. Е. Г. Бровман, Ю. Каган, ЖЭТФ **52**, 557 (1967).
5. В. Т. Geilikman, J. Low Temp. Phys. **4**, 189, (1971).
6. S. Engelsberg and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **131**, 993 (1963).
7. И. П. Ипатова, А. В. Субашиев, ЖЭТФ **66**, 722 (1974).
8. A. S. Alexandrov and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. B **56**, 13731 (1997).
9. M. Reizer, Phys. Rev. B **61**, 40 (2000).
10. В. Л. Гуревич, А. И. Ларкин, Ю. А. Фирсов, ФТТ **IV**(1), 185 (1962).
11. L. A. Falkovsky and E. G. Mishchenko, Phys. Rev. B **51**, 7239 (1995); Е. Ж. Мищенко, Л. А. Фальковский, ЖЭТФ **107**, 936 (1995).
12. P. Perlin, W. Кнар, J. Camassel et al., Phys. Stat. Sol. (b) **198**, 223 (1996); P. Perlin, C. Jauberthie-Cariilon, J. P. Itie et al., Phys. Rev. B **45**, 83 (1992).
13. L. A. Falkovsky, W. Кнар, J. C. Chervin, and P. Wisniewski, Phys. Rev. B **57**, 11349 (1998).