Краткие сообщения по физике № 11 1982

О СВЯЗЫВАНИИ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ С ГРАНИЦЫ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА В КРИСТАЛЛАХ

А. А. Аникьев, В. С. Горелик, Б. С. Умаров

УДК 535.361

Показано, что акустические фононы с минимумом энергии на границе зоны Бриллюэна образуют связанные состояния при отрицательных значениях константы связи $\lambda_4^* = -1,0$. Учет затухания повышает пороговое значение константы связи, при котором образуется связанное состояние фононов.

Как было показано в работах /1-3/, ангармонизм колебаний кристаллической решетки может приводить к появлению в колебательных спектрах кристаллов дополнительных особенностей, соответствующих связанным состояниям фононов. В работе /1/ анализировался случай связывания акустических фононов, имеющих максимум энергии на границе зоны Бриллюэна.

В настоящей работе исследуются условия образования связанных состояний акустических фононов с минимумом энергии на границе зоны Бриллюэна. Кроме того, изучаются условия связывания фононов в зависимости от их времени жизни (коэффициента затухания колебаний). Рассмотрение проводится методом функций Грина (ФГ) на основе общей теории /4/.

Согласно /1/ двухфононная ФГ в импульсном представлении записывается в виде:

$$G_2(\vec{k},\omega) = 2\pi(\vec{k},\omega)/[1 - \lambda_4\pi(\vec{k},\omega)/2], \tag{1}$$

где λ_4 - константа ангармонизма четвертого порядка, $\vec{k}$ - полный импульс двух фононов, а функция $\pi(\vec{k},\omega)$ определяется соотношением

$$\pi(\vec{K}) = \frac{i}{(2\pi)^4}\int G_1^0(\vec{K}_1)G_1^0(\vec{K}-\vec{K}_1)d\vec{K}_1, \quad (\vec{K}=\vec{k},\omega). \tag{2}$$

В (2) вводится ФГ свободных фононов следующим образом:

$$G_1^0(\vec{k},\omega) = \frac{\omega(\vec{k})}{2}\left[\frac{1}{\omega-\omega(\vec{k})+i\Gamma} - \frac{1}{\omega+\omega(\vec{k})-i\Gamma}\right], \tag{3}$$

где $\omega(\vec{k})$ задает закон дисперсии свободных фононов. Трехчастичное взаимодействие в /I/ полагалось малым и учитывалось феноменологически путем введения конечного затухания колебания $\Gamma\neq 0$ в ФГ $G_1^0(\vec{k},\omega)$. Плотность двухчастичных состояний определяется соотношением $\rho_2(\vec{K},\omega) = -(1/\pi\omega_0^2)\,\mathrm{Im}G_2(\vec{K},\omega)$ и с учетом (I) может быть записана в форме:

$$\rho_2(\vec{K},\omega) = -\frac{1}{\pi\omega_0^2}\,\frac{2\,\mathrm{Im}\pi(\vec{K},\omega)}{\left[1-\lambda_4\mathrm{Re}\pi(\vec{K},\omega)/2\right]^2+\left[\lambda_4\mathrm{Im}\pi(\vec{K},\omega)/2\right]^2}. \tag{4}$$

Таким образом, спектр возбуждений системы фононов, в рамках метода /I/, находится из соотношений (2) и (4).

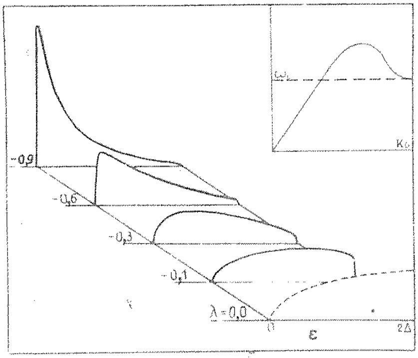
Закон дисперсии фононов с минимумом энергии на границе зоны Бриллюэна можно представить в виде:

$$\omega(\vec{k}) = \omega_0 + (\vec{k}-\vec{k}_0)^2/2m,$$

где ω_0 и $\vec{k}_0$ – энергия и импульс фонона на границе зоны Бриллюэна ($\hbar = 1$), m – эффективная масса фонона. Полагаем, что суммарный импульс связывающихся фононов $\vec{K} = 0$. При этом рассмотрим фононы, соответствующие лишь одной ветви, т.е. $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2 = \vec{k}$. Учитывая первый член в (3) и подставляя его в (2), получаем:

$$\pi(\omega) = \frac{\eta\omega_0^2}{4}\int\frac{(\omega'-\omega_0)^{1/2}d\omega'}{\omega-2\omega'+2i\Gamma}, \tag{5}$$

где $\eta = 2^{1/2}m^{3/2}/(2\pi)^3$. При переходе к (5) мы использовали определение плотности состояний $(1/v)\rho_1(\omega) = (2\pi)^{-3}\int\delta[\omega-\omega(\vec{k})]d\vec{k}$ и учитывали, что вблизи границы зоны можно полагать энергию фонона равной ее минимальному значению ω_0. Интегрирование в



Р и с. I. Плотность двухфононных состояний акустических фононов $\rho_2(\varepsilon)$ с бесконечно большим временем жизни при различных значениях константы связи λ_4''. Вверху справа показана форма дисперсионной ветви с минимумом на границе зоны Бриллюэна

(5) ограничено интервалом (ω_0, ω_{max}). На рис. I в правом верхнем углу схематически показан вид дисперсионной кривой с обозначенным пунктиром нижним пределом интегрирования в (5). Перейдем в (5) к переменным $\omega - 2\omega_0 = \varepsilon$, $2\Gamma = \gamma$ и $\omega' - \omega_0 = t$. Интегрирование (5) в случае $\varepsilon < 0$ (т.е. для частот, расположенных ниже двухфононного континуума) дает:

$$\pi(\varepsilon) = -\frac{\eta\omega_0^2}{4}\Delta^{1/2}\left\{1+\left(\frac{|\varepsilon|}{2\Delta}\right)^{1/2}\operatorname{arctg}\left(\frac{2\Delta}{|\varepsilon|}\right)^{1/2}+i\sigma\right\}. \qquad (6)$$

Здесь обозначено $\Delta = \omega_{max} - \omega_0$, $\sigma = \pi t^{1/2}\delta(\varepsilon - t)$. В случае $\varepsilon < 0$ величина σ является бесконечно малой и для нахождения плотности двухфононных состояний можно воспользоваться известным свойством δ-функции: $\delta(x) = \lim_{\alpha\to 0}\alpha/(x^2+\alpha^2)$. Тогда из (4) и (6) находим:

$$\rho_2(\varepsilon) = (4\xi/\lambda_4'')\delta\left[1 - \lambda_4''\mathrm{Re}\,\pi(\varepsilon)\right]. \qquad (7)$$

Здесь $\xi = \eta\omega_0^2\Delta^{1/2}/4$ и $\lambda_4'' = \xi\lambda_4$. Из (6) и (7) ясно, что выполнение условия $1 + \lambda_4''\left[1 + (|\varepsilon|/2\Delta)^{1/2}\operatorname{arctg}(2\Delta/|\varepsilon|)^{1/2}\right] = 0$ вблизи границы двухфононной зоны $\varepsilon \approx 0$ возможно только начиная с порогового значения $\lambda_4^{\circ} = -1,0$. Таким образом можно сделать вывод, что в рассматриваемом случае при определенном отрицательном значении константы связи λ_4° образуется связанное состояние фононов в области частот $\omega < 2\omega_0$.

Для частот внутри зоны двухфононных состояний $(\varepsilon > 0)$, интегрирование (5) дает

$$\pi(\varepsilon) = -\frac{\eta\omega_0^2}{4}\,\Delta^{1/2}\left\{1 + \left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)^{1/2} \ln|f(\varepsilon,\Delta)| + i\pi\left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)^{1/2}\right\},$$

где $f(\varepsilon,\Delta) = \left[(\varepsilon/2\Delta)^{1/2} - 1\right]/\left[(\varepsilon/2\Delta)^{1/2} + 1\right]$. Плотность двухфононных состояний при этом имеет вид:

$$\rho_2(\varepsilon) = \frac{\xi}{\omega_0^2}\,\frac{(\varepsilon/2\Delta)^{1/2}}{\left[1 + \lambda_4^{\circ}\left\{1 + \left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)^{1/2} \ln|f(\varepsilon,\Delta)|\right\}\right]^2 + \pi^2\lambda_4^{\circ 2}\left(\frac{\varepsilon}{2\Delta}\right)}. \qquad (8)$$

На рис. I представлены графики плотности состояний $\rho_2(\varepsilon)$, построенные при различных значениях константы ангармонизма $\lambda_4^{\circ} \leqslant 0$ на интервале изменения $\varepsilon(0;\ 2\Delta)$, где $2\Delta = 2(\omega_{max} - \omega_0)$. Как видно из этого рисунка, вблизи низкочастотной границы зоны плотность состояний при $\lambda_4^{\circ} = 0$ спадает по закону квадратного корня. При $\lambda_4^{\circ} < 0$, характер изменения плотности состояний вблизи границ зоны резко меняется. С увеличением константы связи $|\lambda_4^{\circ}|$ у низкочастотного края зоны появляется резонансное состояние, которое затем переходит в связанное состояние, отщепляющееся от "дна" зоны при значении $\lambda_4^{\circ} = -1,0$. При этом на высокочастотном краю зоны (при $\omega \simeq 2\omega_{max}$) плотность состояний спадает по логарифмическому закону, а центр тяжести спектра сдвигается в низкочастотную область.

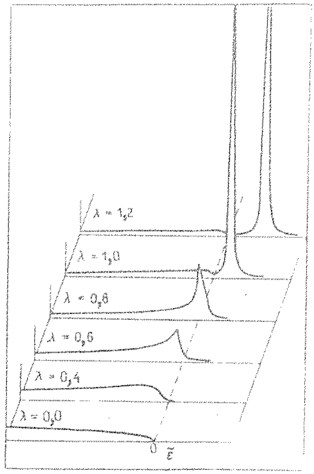
При $\Gamma \neq 0$ и для случая фононов с максимумом энергии на границе зоны Бриллюэна вместо (5) имеем:

$$\pi(\omega) = -\frac{\eta\omega_0^2}{4}\int_0^{\omega_0} \frac{(\omega_0 - \omega')^{1/2}\,d\omega'}{\omega + 2\omega' + 2i\Gamma}. \qquad (9)$$

После перехода к безразмерным переменным $\tilde{t} = (\omega_0 - \omega')/\omega_0$, $\tilde{\varepsilon} = (\omega - 2\omega_0')/\omega_0$, $\tilde{\gamma} = 2\Gamma/\omega_0$ соотношение (9) принимает вид

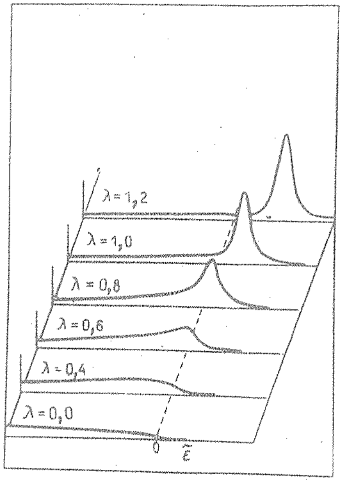
$$\pi(\tilde{\varepsilon}) = -\frac{\eta\omega_0^{5/2}}{4}\int_1^0 \frac{\tilde{t}^{1/2}dt}{\tilde{\varepsilon} + 2\tilde{t} + i\tilde{\gamma}}. \qquad (10)$$

Интеграл (10) рассчитывался численно при различных значениях $\tilde{\gamma}$ в интервале изменения $\tilde{\varepsilon}(-1;0)$. На рис. 2,3 показаны результаты расчета плотности состояний по соотношению (4) с учетом (10) для двух значений параметра затухания: $\tilde{\gamma} = 0{,}01$ и $\tilde{\gamma} = 0{,}05$. Как видно из рис. 2, ангармоническое взаимодействие существенно меняет вид плотности состояний фононов. При увеличении константы связи λ_4'' ($\lambda_4'' > 0$) в спектре появляется резонанс, который затем переходит в связанное состояние, при $\lambda_4'' = 1{,}0$. Рис. 3. демонстрирует изменение условий связывания при



Р и с. 2. Двухфононная плотность состояний акустических фононов $\rho_2(\varepsilon)$ с затуханием $\tilde{\gamma} = 2\Gamma/\omega_0 = 0{,}01$ при различных значениях константы ангармонизма λ_4''. Связанное состояние фононов отщепляется от двухфононной зоны при $\lambda_4'' = 1{,}0$

учете затухания взаимодействующих фононов. Из этого рисунка видно, что связанное состояние образуется уже при $\lambda_4'' = 1,2$, т.е. учет затухания фононов повышает пороговое значение константы связи.



Р и с. 3. Двухфононная плотность состояний $\rho_2(\varepsilon)$ с параметром затухания $\tilde{\gamma} = 0,05$ при различных значениях константы ангармонизма λ_4''. Отщепление связанного состояния происходит при $\lambda_4'' = 1,2$

Таким образом, для рассматриваемой модели кристалла возможно образование связанных состояний фононов при определенных значениях константы ангармонизма ($\lambda_4'' = -1,0$ для фононов с минимумом энергии на границе зоны Бриллюэна). Учет затухания приводит к перенормировке константы связи.

Полученные результаты могут быть использованы для анализа условий связывания фононов в конкретных кристаллических структурах.

Поступила в редакцию
31 мая 1982 г.

Литература

1. J. Ruvalds, A. Zawadowski, Phys. Rev., B2, 1172 (1970).
2. В. М. Агранович, ФТТ, I2, 562 (I970).
3. Л. П. Питаевский, ЖЭТФ, 70, 738 (I976).
4. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М., I962 г.