

## Взаимодействие длинноволновых возбуждений в кристаллах

© А.А. Аникьев, Д.Е. Едгорбеков

Худжандский государственный университет,  
735700 Худжанд, Таджикистан

(Поступила в Редакцию 13 марта 1998 г.)

Методом двухчастичных функций Грина исследованы условия резонансного взаимодействия фононов для скалярной модели кристалла в области начального линейного участка дисперсионной кривой акустических фононов.

При расчете спектров взаимодействия различных элементарных возбуждений с фононами в области малых импульсов обычно пользуются линейным законом дисперсии для акустических фононов. Кроме того, получение термодинамических характеристик кристаллов основано, как правило, на использовании плотности состояний акустических фононов, вычисленной в дебаевском приближении или комбинированном эйнштейновском и дебаевском приближении для закона дисперсии. В результате взаимодействия различных типов возбуждений с акустическими фононами происходит перестройка исходного линейного закона дисперсии фононов. Отклонение закона дисперсии акустических фононов от линейного на малых импульсах наблюдается, например, в сильно анизотропных кристаллах [1], при наличии большой концентрации тяжелых примесей и т.д. В работах [2–5] было показано, что радикальная перестройка фононного спектра может происходить также и в случае фонон-фононного взаимодействия с образованием связанных или резонансных состояний фононов в кристаллах. При этом в [5] было высказано предположение, что слабо связанные состояния фононов в кристаллах должны существовать всегда, так как на дисперсионных кривых фононов всегда найдутся особые точки в пространстве волновых векторов, подчиняющиеся общим условиям.

В настоящей работе исследованы условия резонансного взаимодействия фононов для скалярной модели кристалла [6] в области начального линейного участка дисперсионной кривой акустических фононов. Рассмотрение будем проводить методом двухчастичных функций Грина (ФГ) при комнатной температуре [3]. Нам необходимо рассчитать плотность двухфононных состояний акустических фононов с учетом процессов взаимодействия и закон дисперсии полученных возбуждений. В "лестничном" приближении для ФГ в импульсном представлении запишем решение уравнения Бете–Солипитера в виде [3]

$$G_2(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\pi(\mathbf{k}, \omega)}{1 - \frac{1}{2}\lambda_4\pi(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (1)$$

где  $\lambda_4$  — константа фонон-фононного взаимодействия четвертого порядка, функция  $\pi(\mathbf{k}, \omega)$  есть свертка

двух однофононных ФГ

$$\pi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i}{(2\pi)^4} \times \int G_1^0(\mathbf{k}, \omega) G_1^0(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1, \omega - \omega_1) d\omega_1 d\mathbf{k}_1. \quad (2)$$

ФГ свободных фононов  $G^0(\mathbf{k}_1, \omega)$  выбирается в виде

$$G^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\omega_0(\mathbf{k})}{2} \times \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_0(\mathbf{k}) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_0(\mathbf{k}) - i\delta} \right\} \quad (3)$$

с законом дисперсии акустических фононов  $\omega_0(\mathbf{k}) = s|\mathbf{k}|$ . Плотность двухфононных состояний определяется мнимой частью ФГ (1)

$$\rho_2(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_2(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{2 \text{Im} \pi(\mathbf{k}, \omega)}{|1 - \frac{1}{2}\lambda_4\pi(\mathbf{k}, \omega)|^2}. \quad (4)$$

Закон дисперсии двухфононных возбуждений определяется уравнением

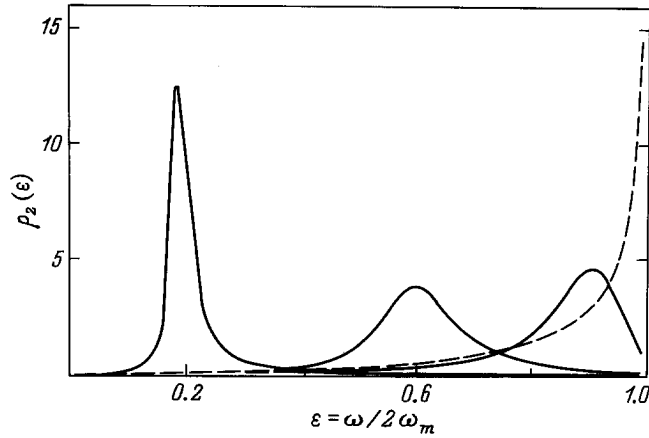
$$1 - \frac{1}{2}\lambda_4\pi(\mathbf{k}, \omega) = 0. \quad (5)$$

Из соотношений (4) и (5) видно, что для исследования спектров возбуждений с взаимодействием необходимо рассчитать функцию  $\pi(\mathbf{k}, \omega)$  и найти (4) и (5) при различных значениях  $\lambda_4$ . После подстановки (3) в (2) и интегрирования по  $\omega_1$  имеем для случая взаимодействующих фононов с общим импульсом  $k = 0$  из одной дисперсионной ветви

$$\pi(\varepsilon) = \frac{2s_0}{(2\pi)^2 4s} \int_0^{k_m} \frac{d^3 k}{\varepsilon - k^2 + i\delta}. \quad (6)$$

Здесь  $\varepsilon = \omega^2/4s^2$  и интегрирование производится до некоторого обрезывающего линейный закон дисперсии значения импульса  $k_m$ . В модели Дебая  $k_m = k_0$  и  $sk_0 = \omega_0$ . Перепишем (6) в виде

$$\pi(\varepsilon) = \frac{2s}{(2\pi)^2 4s_0^2} \int_0^{k_m} \frac{k^3 dk}{\varepsilon - k^2} - i \frac{2s}{4\pi 4s_0^2} \int k^3 \delta(\varepsilon - k^2) dk. \quad (7)$$



**Рис. 1.** Плотность состояний акустических фононов с дебаевским законом дисперсии.

После интегрирования в (7) имеем

$$\operatorname{Re} \pi(\varepsilon') = \frac{(2\omega_{\max})^2}{8\pi^2(2s)^2} \left( 1 + (\varepsilon')^2 \ln \left| \frac{(\varepsilon')^2 - 1}{(\varepsilon')^2} \right| \right), \quad (8)$$

$$\operatorname{Im} \pi(\varepsilon') = -\frac{(2\omega_{\max})^2}{8\pi^2(2s)^3} (\varepsilon')^2. \quad (9)$$

Здесь  $\varepsilon' = \omega^2/2sk_m$  соответствует верхней границе двухфононного акустического спектра. Невозмущенная плотность состояний двух фононов определяется из (9) и (4) при  $\lambda_4 = 0$

$$\rho_2^0(\omega) = \frac{\omega^2}{8\pi^2(2s)^3} = \frac{3V_0}{(2\omega_0)^3} \omega^2 \quad (10)$$

в случае, когда максимальное значение  $\omega_m = \omega_0 = \left(\frac{6\pi^2}{V_0}\right)^{1/3} \cdot s$  соответствует дебаевской частоте  $\omega_0$ . Плотность состояний (10) изображена на рис. 1 штриховой линией. С учетом взаимодействия плотность двухфононных состояний определяется соотношениями (4), (8), (9). Решения существуют только для отрицательных значений перенормированной константы связи  $\lambda'_4 = \frac{(2\omega_m)^2}{8\pi^2(2s)^3} \lambda_4$ . Изменение спектров плотности состояний при включении взаимодействия для значений  $\lambda_4 = -0.1$ ;  $\lambda_4 = -0.2$  и  $\lambda_4 = -0.3$  показано на рис. 1 сплошными линиями. Видно, что в спектре с увеличением константы связи  $\lambda_4$  появляется максимум резонансного состояния фононов, интенсивность которого резко возрастает, а сам максимум сдвигается к низкочастотной границе спектра. В (7) мы проводили формально интегрирование по импульсам от  $k = 0$  до  $k = k_m$ . Это правомерно только для бесконечно протяженных тел. В случае реального кристалла, имеющего конечный объем, мы должны интегрировать от некоторого значения  $k = k_0$ ,  $k_0 = (V)^{-1/3}$ , где  $V$  — объем кристалла. В этом случае выражение (8)

преобразуется к виду

$$\operatorname{Re} \pi(\omega) = -\frac{(k_m - k_0)^2}{8\pi^2 2s} \times \left( 1 + \frac{\omega^2}{2s^2(k_m - k_0)^2} \ln \frac{\frac{\omega^2}{2sk_m^2} - 1}{\frac{\omega^2}{2sk_0^2} - 1} \right). \quad (11)$$

Тем не менее уравнение (11) не изменяет в принципе результатов, так как мы использовали приближение, в котором константа связи  $\lambda_4$  не зависит от импульса. В случае длинноволновых возбуждений вершина, описывающая процесс рассеяния фононов на фононе, должна быть пропорциональна импульсу, так как при  $k \rightarrow 0$  в однородной среде рассеяния не происходит [7]. В рассмотренном случае фононов с линейным законом дисперсии связанного состояния фононов не может существовать вне двухфононной зоны.

## 1. Акустические фононы, имеющие нелинейный участок на дисперсионной кривой

Теперь предположим, что акустические фононы имеют закон дисперсии  $\omega(\mathbf{k}) = s_0|\mathbf{k}| - a|\mathbf{k}|^3$  ( $a > 0$ ). Функцию  $\pi(\rho, \omega)$  для неравного нулю суммарного импульса  $\rho$  можно записать в виде

$$\pi(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{p} - \mathbf{k}) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega(\mathbf{k}) + \omega(\mathbf{p} - \mathbf{k}) - i\delta} \right\}. \quad (12)$$

Преобразуем выражение в фигурных скобках, вводя новый волновой вектор  $\mathbf{q} = \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}$ . Тогда (12) принимает вид ( $\varepsilon = \omega - 2\omega(\mathbf{p})$ )

$$\pi(\mathbf{p}, \omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\Lambda \frac{k^2 dk}{\varepsilon + 3apk^2}. \quad (13)$$

Здесь интегрирование распространяется до некоторого предельного значения  $\Lambda_m$ , где выполняется выбранный закон дисперсии. Для закона дисперсии таких колебаний из (4) имеем

$$1 - \frac{\lambda_4 \Lambda}{(2\pi)^2 3ap} \times \left[ 1 - \left( \frac{\varepsilon}{3ap\Lambda} \right)^{1/2} \operatorname{arctg} \left( \frac{3ap\Lambda}{\varepsilon} \right)^{1/2} \right] = 0. \quad (14)$$

Разлагая функцию  $\operatorname{arctg} x$  в ряд по степеням  $x$  при  $x > 1$  ( $\varepsilon \approx 0$ ) имеем для закона дисперсии

$$\omega(\mathbf{p}) = 2(s\mathbf{p} - a|\mathbf{p}|^3) + \frac{2\pi}{3} \lambda_4 \Lambda^3. \quad (15)$$

Таким образом, при  $\mathbf{p} = 0$  ветвь связанного состояния оканчивается при отличном от нуля значении частот  $\omega = \frac{2\pi}{3}\lambda_4\Lambda^3$ , которое определяется константой связи  $\lambda_4$  и предельным значением волнового вектора  $\Lambda$ . Из (15) ясно, что ветвь связанного состояния существует при любых малых значениях  $\lambda_4$ , а при  $\lambda_4 = 0$  закон дисперсии (15) переходит в исходный закон дисперсии.

## 2. Акустические фононы в сильно анизотропных кристаллах

В сильно анизотропных кристаллах закон дисперсии акустических фононов даже одной ветви может быть различным для направлений вдоль оси симметрии и в плоскости перпендикулярной к ней. Так, например, для сложных кристаллов закон дисперсии ветви поперечных акустических фононов может быть аппроксимирован соотношением [8]

$$\omega^2(\mathbf{k}) = s_{\perp}^2 k_{\perp}^2 + ak_{\perp}^4 + b \sin^4 \frac{k_{\parallel} a}{2}, \quad (16)$$

где  $k_{\parallel}$  и  $k_{\perp}$  — проекции волнового вектора на ось местного порядка и на плоскость перпендикулярную к ней,  $s_{\perp}$  — скорость звука в слое,  $b$  — скорость звука вдоль оси анизотропии, коэффициент  $a$  определяется силовыми константами межатомного взаимодействия внутри слоя. Первые два члена определяют закон дисперсии акустических фононов внутри слоя, причем  $s_{\perp} \ll a$  [8], а последний член описывает закон дисперсии акустических фононов вдоль оси анизотропии. Исследуем условия связывания акустических фононов с законом дисперсии (16), ограничиваясь первым членом в разложении синуса в правой части. Для нахождения дисперсионной ветви связанного состояния определим решения уравнения (4) с функцией  $\pi(\mathbf{p}, \omega)$ , даваемой (12), с учетом только первого члена в фигурных скобках. Введем вектор  $\mathbf{q} = \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}$  и направим вектор  $\mathbf{p}$  вдоль оси шестого порядка. Обозначим  $\varepsilon = 2\omega_0(\frac{\mathbf{p}}{2}) - \omega$ , где  $\omega_0(\frac{\mathbf{p}}{2}) = bp_{\parallel}^2 + cp_{\perp}^4 + \dots$ . Получим

$$\pi(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int \frac{q_{\perp} dq_{\perp} dq_{\parallel}}{\varepsilon + s_{\perp}^2 q_{\perp}^2 + bq_{\parallel}^2 + aq_{\perp}^4}. \quad (17)$$

После интегрирования по  $q_{\parallel}$  имеем

$$\pi(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{8\pi} \int_0^{\Lambda} \frac{q_{\perp} dq_{\perp}}{(\varepsilon + s_{\perp}^2 q_{\perp}^2 + aq_{\perp}^4)^{1/2}}. \quad (18)$$

Интегрирование в (17) должно обрезаться на верхнем пределе некоторым  $q_{\max} = \Lambda$ . При  $\varepsilon < s_{\perp}^4/4a$

получаем [8]

$$\pi(\mathbf{p}, \omega) = -\frac{1}{16\pi s_{\perp}^2 \sqrt{1 - \frac{4a\varepsilon}{s_{\perp}^4}}} \times \ln \left| \frac{[s_{\perp}^2 \delta (2 - \frac{1}{2}\delta) / 4a\Lambda^2] + 2 - \frac{1}{2}\delta}{[s_{\perp}^2 \delta (2 - \frac{1}{2}\delta) / 4a\Lambda^2] + \frac{1}{2}\delta} \right|. \quad (19)$$

Здесь введено обозначение

$$\delta = 4a\varepsilon/s_{\perp}^4 \quad (\varepsilon \approx 0).$$

С учетом неравенства  $a \gg s_{\perp}^2$  закон дисперсии возбужденный вблизи порога образования резонансного состояния  $\varepsilon \approx 0$  можно представить следующим образом:

$$1 + \frac{\lambda_4 (1 + \frac{1}{2}\delta)}{16\pi s_{\perp}^2} \ln \left| \frac{4 - \delta}{\delta} \right| = 0. \quad (20)$$

Из этого соотношения видно, что вблизи порога константа связи должна иметь отрицательный знак. Закон дисперсии будет иметь вид

$$\omega(\mathbf{p}) = 2\omega_0 \left( \frac{\mathbf{p}}{2} \right) - \frac{s_{\perp}^4}{4a} \left( 4 + \frac{64\pi s_{\perp}^2}{3\lambda_4} \right)^{1/2}, \quad (21)$$

где  $\omega_0(\mathbf{p}/2)$  определяется соотношением (16). Таким образом, при значении импульса  $p = 0$  частота имеет отличное от нуля значение

$$\omega = \frac{s_{\perp}^4}{2a} \left( 1 + \frac{16\pi s_{\perp}^2}{3\lambda_4} \right)^{1/2}. \quad (22)$$

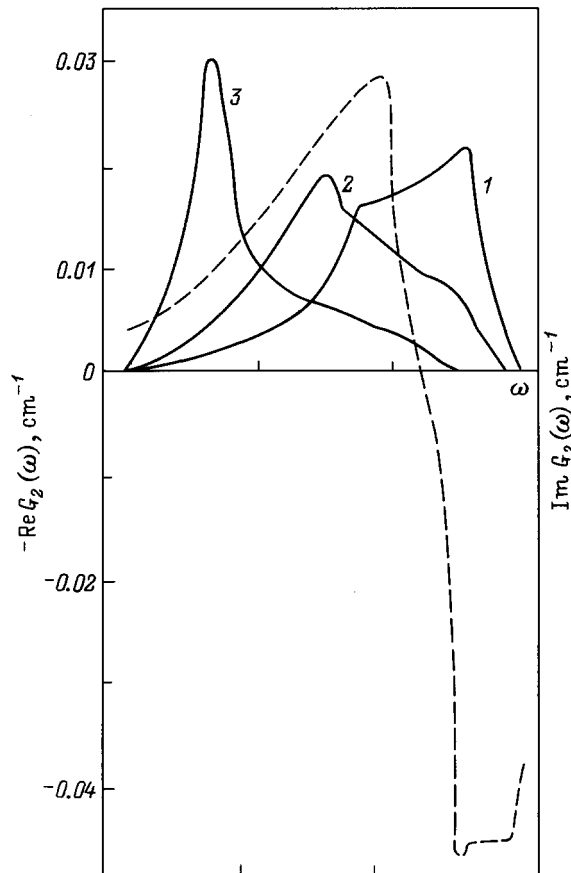
При этом образование ветви связанного состояния происходит начиная с некоторого порогового значения  $\lambda_4$ , определяемого соотношением  $|\lambda_4| \geq 16\pi s_{\perp}^2/3$ . С возрастанием значения  $|\lambda_4|$  частота  $\omega$  ( $p = 0$ ) также возрастает.

## 3. Акустические фононы с синусоидальным законом дисперсии для скалярной модели кристалла

До сих пор мы исследовали закон дисперсии акустических фононов, получающийся разложением на малых импульсах более общего закона дисперсии, который для скалярной модели кристалла выражается в виде

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_m^2 \sin^2 \frac{\mathbf{k}a}{2}. \quad (23)$$

Здесь  $\omega_m$  — максимальная частота на границе зоны Бриллюэна при  $k = \pi/a$  и  $a$  — постоянная решетки. Для расчета плотности состояний акустических фононов с законом дисперсии (23) воспользуемся определением



**Рис. 2.** Плотность акустических двухфоновых состояний при различных константах четырехфоновнного взаимодействия.  $\lambda_4 = -0.1$  (1),  $-0.2$  (2),  $-0.3$  (3). Штриховая линия — невозмущенная плотность состояний.

(12) функции  $\pi(\mathbf{p}, \omega)$  с учетом обоих членов пропагатора в фигурных скобках. Для суммарного импульса двух фононов  $p = 0$  получаем

$$\pi(\omega) = \frac{2\omega_m}{(2\pi)^2} \int \frac{|\sin \frac{ka}{2}| d\mathbf{k}}{\omega^2 - 4\omega_m^2 \sin^2 \frac{ka}{2} + i\delta}. \quad (24)$$

Выделяя действительную и мнимую части, имеем

$$\text{Re } \pi(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2 a^3 \omega_m} \int_0^{\pi/2} \frac{z^2 dz \sin z}{\varepsilon^2 - \sin^2 z}, \quad \begin{cases} z = \frac{ka}{2}, \\ \varepsilon = \omega/2\omega_m \end{cases} \quad (25)$$

$$\text{Im } \pi(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi a^3 \omega_m} \frac{(\arcsin |\varepsilon|)^2}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}. \quad (26)$$

Интеграл в (25) расходится на верхнем пределе, и вычислить его аналитически не представляется возможным. Поэтому мы его рассчитали численно при значениях  $\varepsilon$  в интервале  $0-0.99$  с шагом  $\Delta z = 2 \cdot 10^{-5} \pi$ . Затем рассчитанные значения  $\pi(\varepsilon)$  были подставлены в соотношение (4) и была рассчитана двухфоновная плотность состояний с учетом взаимодействия акустических

фононов. При  $\lambda^4 = 0$  невозмущенная часть плотности состояний определяется формулой (26), разделенной на  $\pi$ . На рис. 2 штриховой линией изображена плотность состояний  $\rho_2^0(\varepsilon)$  с законом дисперсии (23). Как видно из (25),  $\text{Re } \pi(\varepsilon)$  отрицательна при всех значениях  $\varepsilon$  в интервале  $(0; 1)$ , что соответствует двухфононному частотному интервалу с границами  $0$  и  $2\omega_m$ . Поэтому решения уравнения (5) существуют только для отрицательных значений константы ангармонизма  $\lambda_4$ . Сплошными линиями на рис. 2 изображена плотность двухфононных состояний  $\rho_2(\varepsilon)$  при различных значениях  $\lambda_4$ :  $-0.1$ ,  $-0.2$ ,  $-0.3$ . Из рис. 2 видно, что учет резонансного взаимодействия фононов радикально изменяет исходную плотность двухфононных состояний. На низкочастотном участке спектра с возрастанием константы присутствия появляется аномально резкий пик, в то время как на высокочастотном краю зоны плотность состояний плавно спадает до нуля. По-видимому, указанные особенности на спектре акустических фононов являются общими и для взаимодействия фононов с другими элементарными возбуждениями, например с дефектами, краудинами, электронами и т.д. Одним из указаний на это может служить плотность состояний акустических фононов, восстановленная из туннельных измерений в сверхпроводящих металлах: свинце, ртути, ниобии. Восстановленный спектр имеет явный "антидебаевский" вид с резким пиком на низкочастотном участке спектра [9,10]. В связи с этим возникает задача исследования влияния процессов взаимодействия фононов с другими, близкими по энергии, возбуждениями на условия образования связанных и гибридных состояний фононов и форму их закона дисперсии. Изученные примеры показывают, что для фононов с линейным законом дисперсии в скалярной модели решетки связанные состояния не возникают вне двухфононной зоны. Наличие сильной анизотропии улучшает условия связывания. Наряду с затравочным законом дисперсии, в спектре может возникать ветвь связанного состояния с  $\lambda_4 \geq 16\pi S_{\perp}^2/3$ .

### Список литературы

- [1] R.M. Nicklew, H.G. Smith. Phys. Rev. **39**, 8, 4951 (1972).
- [2] M.H. Cohen, J. Rivalds. Phys. Rev. Lett. **23**, 1378 (1969).
- [3] A. Zavadowski, J. Rivalds. Phys. Rev. Lett. **24**, 1111 (1970).
- [4] J. Rivalds, A. Zavadowski. Phys. Rev. **B2**, 1178 (1970).
- [5] Л.П. Пигаевский. ЖЭТФ **70**, 4, 738 (1976).
- [6] А.А. Аникьев, В.С. Горелик, Б.С. Умаров. ФТТ **26**, 9, 2773 (1984).
- [7] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз, М. (1962). С. 426.
- [8] А.М. Косевич. Физическая механика реальных кристаллов. Наук. думка. Киев (1981). С. 105.
- [9] Э. Бурнштейн, А. Лундквист. Туннельные явления в твердых телах. Мир, М. (1973). С. 421.
- [10] В. Буккель. Сверхпроводимость. Мир, М. (1975). С. 316.