

ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫЙ МЕХАНИЗМ ЗАТУХАНИЯ КОЛЕБАНИЙ: ЭФФЕКТ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

А. И. Волокитин

В рамках модели Андерсона вычислена мнимая часть поляризационного оператора фононной функции Грина для локального колебания, которая определяет скорость колебательной релаксации Γ . Полученная формула для Γ при $T = 0$ К имеет одинаковый вид как при $U=0$, так и при $U \neq 0$, где U — энергия кулоновского отталкивания. Из эквивалентности Γ и коэффициента трения η показано, что известная формула для η справедлива при более общих условиях, чем предполагалось при ее выводе. Обсуждается проблема температурной зависимости Γ , которая может быть сильной в случае, когда примесный атом находится в конденсованном режиме.

Основным механизмом затухания высокочастотного локального колебания в металле является электронно-дырочный механизм (ЭДМ), связанный с возбуждением электронно-дырочных пар за счет электрон-фононного взаимодействия. В последние годы ЭДМ привлекает особенно большое внимание из-за бурного развития колебательной спектроскопии адсорбатов и большого интереса к изучению динамических процессов на поверхности [1-4]. При рассмотрении ЭДМ часто привлекается модель Андерсона [5]. Для скорости колебательной релаксации Γ , связанной с временем жизни τ соотношением $\Gamma = \tau^{-1}$ ($\hbar = 1$), были получены формулы, справедливые в различных частных случаях [3, 4]. За исключением [3], во всех остальных работах, обзор которых сделан в [4], рассматривался случай, когда энергия кулоновского отталкивания двух электронов с противоположными спинами на примесном атоме $U=0$.

В настоящей работе приводится вывод более общей формулы для Γ , которая охватывает в качестве частных случаев известные результаты. Взаимодействие локального колебания с электронами металла будем описывать гамильтонианом типа Андерсона [5]

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}, \quad (1)$$

$$H_{el} = \sum_{\sigma} \epsilon_a n_{a\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{ak} c_{a\sigma}^+ c_{k\sigma} + \text{э. с.}) + U n_{a\sigma} n_{a-\sigma}, \quad (2)$$

$$H_{ph} = \omega_0 b^+ b, \quad H_{el-ph} = Fq, \quad (3), (4)$$

$$F = \sum_{\sigma} \epsilon'_a n_{a\sigma} + \sum_{k\sigma} (V'_{ak} c_{a\sigma}^+ c_{k\sigma} + \text{э. с.}), \quad (5)$$

где $q = Q_0(b^+ + b)$; $Q_0 = (2m\omega_0)^{-1/2}$; b^+ — оператор рождения фонов для колебаний примесного атома с массой m и частотой ω_0 ; $\epsilon'_a = d\epsilon_a/dq$; $V'_{ak} = dV_{ak}/dq$. Фурье-образ фононной функции Грина

$$D(\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle 0 | \hat{T} \varphi(t) \varphi(0) | 0 \rangle dt, \quad (6)$$

$$\varphi(t) = b^+(t) + b(t)$$

при $T = 0$ К определяется формулой

$$D(\omega) = 2\omega_0/(\omega^2 - \omega_0^2 - 2\omega_0\Pi(\omega)), \quad (7)$$

где поляризационный оператор

$$\Pi(\omega) = -iQ_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} \langle 0 | \hat{T} F(t) F(0) | 0 \rangle dt = Q_0^2 \tilde{\Pi}(\omega), \quad (8)$$

$|0\rangle$ — основное состояние гамильтониана H_{el} . Скорость колебательной релаксации Γ определяется мнимой частью $\Pi(\omega)$

$$\Gamma = -2 \operatorname{Im} \Pi(\omega_0 + i\delta). \quad (9)$$

Используя представление двухчастичной функции Грина с помощью одночастичных функций Грина и вершинной части [6], можно записать

$$\begin{aligned} \tilde{\Pi}(\omega) = & -2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G(\omega_1) [\mu(\omega_1 + \omega) + \mu(\omega_1 - \omega)] - 2i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} G(\omega_1) G(\omega_1 + \\ & + \omega) A(\omega_1, \omega_1 + \omega) A(\omega_1 + \omega, \omega_1) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_2}{2\pi} G(\omega_1) G(\omega_1 + \\ & + \omega) A(\omega_1, \omega_1 + \omega) \sum_{\sigma\sigma'} \Gamma_{\sigma\sigma'} \sigma'_{\sigma}(\omega + \\ & + \omega_1, \omega_2; \omega_2 + \omega, \omega_1) G(\omega_2) G(\omega_2 + \omega) A(\omega_2 + \omega, \omega_2), \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$\mu(\omega) = \sum_k \frac{|V'_{ak}|^2}{\omega + i\delta \operatorname{sign} \omega - \varepsilon_k}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} A(\omega_1, \omega_2) = & \varepsilon'_a + \sum_k \frac{V'_{ak} V_{ak}^*}{\omega_1 + i\delta \operatorname{sign} \omega_1 - \varepsilon_k} + \\ & + \sum_k \frac{V_{ak}^* V_{ak}}{\omega_2 + i\delta \operatorname{sign} \omega_2 - \varepsilon_k}, \end{aligned} \quad (12)$$

а одноэлектронная функция Грина

$$G(\omega) = 1 \left/ \left[\omega - \varepsilon_a - \sum_k \frac{|V_{ak}|^2}{\omega + i\delta \operatorname{sign} \omega - \varepsilon_k} - \Sigma(\omega + i\delta \operatorname{sign} \omega) \right] \right., \quad (13)$$

$\Sigma(\omega)$ — неприводимая собственно-энергетическая часть, связанная с кулоновским взаимодействием. При $\omega \ll \omega_f$, $\omega_f = \min\{T_K, \Delta\}$, где ширина электронного уровня

$$\Delta = \pi \sum_k |V_{ak}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (14)$$

а температура Кондо

$$T_K \simeq D \exp[-\pi |\varepsilon_a| |\varepsilon_a + U| / 2U\Delta], \quad (15)$$

можно записать

$$\tilde{\Pi}(\omega) = \tilde{\Pi}(0) - i|\omega| d\tilde{\Pi}(\omega)/d\omega|_{\omega=+0} + O\left(\left(\frac{\omega}{\omega_f}\right)^2\right), \quad (16)$$

$\tilde{\Pi}(0)$ — действительная величина. Так как обычно выполняется условие $\omega_0 \ll \omega_f$, то для вычисления Γ при $T=0$ К достаточно вычислить производную $d\tilde{\Pi}(\omega)/d\omega|_{\omega=+0}$. После вычислений, аналогичных тем, которые были проведены в работах [7, 8], и с учетом тождества Уорда [6]

$$\frac{d\Sigma(\omega)}{d\omega} = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega_1}{2\pi} \sum_{\sigma'} \Gamma_{\sigma\sigma'}(\omega, \omega_1; \omega_1, \omega) G^2(\omega_1) A(\omega_1, \omega_1) \quad (17)$$

Получим

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2, \quad (18)$$

$$\Gamma_1 = \frac{4}{\pi m} \sin^2 \delta(0) \left[\frac{W(0)}{\Delta(0)} - \left(\frac{1}{2} \frac{\Delta'(0)}{\Delta(0)} \right)^2 \right], \quad (19)$$

$$\Gamma_2 = \frac{2}{\pi m} (\delta'(0))^2. \quad (20)$$

где

$$W(\varepsilon) = \sum_k |V'_{\sigma k}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_k), \quad (21)$$

а обобщенный фазовый сдвиг определяется формулой

$$\delta(\varepsilon) = -\text{Im} \ln G^{-1}(\varepsilon). \quad (22)$$

С учетом равенства $\text{Im} \Sigma(+0) = 0$ [9] получим

$$\delta(0) = \text{arctg} \frac{\Delta(0)}{\varepsilon_a + \Lambda(0) + \Sigma(+0)}, \quad (23)$$

где

$$\Lambda(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Delta(\varepsilon') d\varepsilon'}{\varepsilon - \varepsilon'}. \quad (24)$$

Важно отметить, что при $T=0$ К формула для Γ имеет одинаковый вид как при $U=0$, так и при $U \neq 0$. Кулоновское отталкивание приводит только к перенормировке энергии электронного уровня $\varepsilon_a \rightarrow \varepsilon_a + \Sigma(+0)$. Качественно этот результат был предсказан в [10] на основе ренорм-групповых соображений. Проведенный в настоящей работе анализ позволил придать этому утверждению точный характер. Когда $\Delta(\varepsilon) = \text{const}$, из правила сумм Фриделя [7] следует, что

$$\delta(0) = \pi/2 \langle n_a \rangle, \quad (25)$$

где $\langle n_a \rangle = \langle 0 | n_{a\sigma} + n_{a-\sigma} | 0 \rangle$. Если $V_{\sigma k}$ не зависит от k и плотность зонных состояний является константой, то известна точная аналитическая формула для $\langle n_a \rangle$, полученная с помощью анзаца Бёте [11]. Однако при этом $\Gamma_1 \equiv 0$, так как

$$(W/\Delta) = (V'/V)^2, \quad (\Delta'/2\Delta) = (V'/V)^2.$$

В однородном случае $\Delta' = 0$, $\varepsilon'_a = 0$, $V_{\sigma k}(q) = \exp(ikq) V$, $V'_{\sigma k}(0) = ik_z V$, поэтому $\Gamma_2 = 0$, но $\Gamma_1 \neq 0$, т. е. диссипация энергии связана с зависимостью $V_{\sigma k}$ от k . При вычислении Γ_1 в однородном случае точную формулу для $\langle n_a \rangle$ можно использовать для вычисления $\sin^2 \delta(0)$. Для вычисления $W(0)$ необходимо учитывать зависимость $V_{\sigma k}$ от k .

Равенство $\Gamma = \eta$ [3, 12, 13] показывает, что формулы (19) и (20) определяют также коэффициент трения η , который вычислялся в работе [8] при условии $\varepsilon'_a = 0$ и $V_{\sigma k}$ — действительная величина. Из результатов настоящей работы видно, что формулы (19) и (20) определяют коэффициент трения при более общих условиях, чем предполагалось при первоначальном их выводе в работе [8].

При рассмотрении температурной зависимости Γ надо различать два случая. Если $\omega_0 \ll \omega_f$, что реализуется при малых значениях U или асимметричном расположении уровней (режим промежуточной валентности, когда $\varepsilon_a \approx 0$, либо $\varepsilon_a + U \approx 0$), то следует ожидать слабой температурной зависимости Γ . В частности, при $U=0$ температурная зависимость Γ

вычислялась в работах [3, 14]. Было показано, что основной вклад в температурную зависимость Γ возникает в четвертом порядке теории возмущений. Этот вклад линейно зависит от температуры и связан с дефазировкой колебаний за счет интерференции процессов упругого рассеяния электронов на виртуальных дырках и дырок на виртуальных электронах. Температурно-зависящий вклад в Γ при $U=0$ значительно меньше температурно-независящего вклада, связанного с затуханием колебаний. Сильная температурная зависимость Γ ожидается при $\omega_0 \gg T_K$, что может иметь место при симметричном расположении уровней и большом значении U (кондовский режим, $|\epsilon_n| \sim |\epsilon_n - U| \gg \Delta$, $U \gg \Delta$), поскольку в теории появляется малый параметр T_K — температура Кондо. В этом случае использование разложения (16) является незаконным, поэтому для вычисления поляризационного оператора $\Pi(\omega)$ необходимо использовать другой подход. В частности, в работе [8] температурная зависимость Γ_1 рассматривалась на основе аналогии, которая существует между Γ_1 и добавочным электросопротивлением R за счет примесей в сплавах. Была обнаружена сильная температурная зависимость Γ_1 , когда примесный атом находится в кондовском режиме. Температурная зависимость Γ_2 при $U \neq 0$ до настоящего времени не рассматривалась. Однако в кондовском режиме также можно ожидать сильной температурной зависимости Γ_2 . Поэтому представляло бы несомненный интерес наблюдение для Γ эффекта, аналогичного эффекту Кондо в сплавах. В случае адсорбции T_K сильно зависит от расстояния от адатома до поверхности, что приведет к сильной зависимости Γ от положения адатома. Это может оказаться важным при изучении динамических процессов на поверхности [15].

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Langreth D. C. // *Physica Scripta*. 1987. V. 35. N 1. P. 185—192.
- [2] Tobin R. G. // *Surf. Sci.* 1987. V. 183. N 1—2. P. 226—250.
- [3] Volokitin A. I., Braun O. M., Yakovlev V. M. // *Surf. Sci.* 1986. V. 172. N 1—2. P. 31—46.
- [4] Жданов В. П. *Элементарные физико-химические процессы на поверхности*. Новосибирск. 1988. 319 с.
- [5] Anderson P. W. // *Phys. Rev.* 1961. V. 124. N 1. P. 41—53.
- [6] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. М., 1962. 443 с.
- [7] Shiba H. // *Progr. Theor. Phys.* 1975. V. 54. N 4. P. 967—981.
- [8] Yoshimori A., Motchane J. L. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1982. V. 51. N 6. P. 1826—1833.
- [9] Langreth D. C. // *Phys. Rev.* 1966. V. 150. N 2. P. 516—518.
- [10] Мальшуков А. Г. // Автореф. докт. дис. М., 1987.
- [11] Wiegmann P. B., Tsvetlick A. M. // *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* 1983. V. 16. N 12. P. 2281—2319.
- [12] Hellsing B., Persson M. // *Physica Scripta*. 1984. V. 29. N 2. P. 360—371.
- [13] Волокитин А. И. // *ФТТ*. 1984. Т. 26. № 1. С. 155—159.
- [14] Волокитин А. И. // *ФТТ*. 1988. Т. 30. № 7. С. 1944—1947.
- [15] Braun O. M., Волокитин А. И. // *ФТТ*. 1986. Т. 28. № 4. С. 1008—1014.

Политехнический институт
им. В. В. Куйбышева
Куйбышев

Поступило в Редакцию
8 июля 1988 г.
В окончательной редакции
21 ноября 1988 г.