УДК 537.226; 537.311.322

Ю. П. ДРОЖЖОВ

ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВБЛИЗИ ОСОБЕННОСТИ ВАН-ХОВА

§ 1. Введение. При выводе уравнения для массового оператора электронов, взаимодействующих с акустическими фононами в окрестности особой точки Ван-Хова [1], мы считали температуру решетки достаточно высокой. Тогда даже при малых энергиях электронов возможны процессы поглощения реальных фононов. С этим связано основное отличие нашей задачи от чисто «поляронной» и невозможность использования стандартных методов теории возмущений по константе электрон-фононной связи g_0^2. Поэтому полученное в [1] уравнение не опиралось на теорию возмущений, однако оно имело логарифмическую особенность при малых энергиях, что приводило к ограничению снизу на область применимости найденного решения. Как будет показано ниже, решение, приведенное в [1], в действительности справедливо во всей окрестности особой точки. Упомянутая особенность в уравнении смещается с действительной оси в комплексную плоскость энергии, если учесть мнимую часть массового оператора, обусловленного взаимодействием с фононами в далеких (по квазиимпульсу) областях зоны Бриллюэна.

Мы покажем, что взаимодействие с фононами в нашем случае существенно влияет на характеристики электронного газа вблизи особенности. В непосредственной близости к особой точке нельзя ввести понятие спектра квазичастиц. При бóльших энергиях спектр становится линейным по квазиимпульсу и плавно переходит в затравочный квадратичный с ростом энергии, а изменение плотности состояний становится плавным в отличие от затравочного ступенчатого.

§ 2. Пороговые особенности вблизи критической точки Ван-Хова. Сильное изменение свойств электронного газа вблизи особой точки физически связано с тем, что в нашей задаче существенно поведение электрона в припороговой области энергий, т. е. вблизи порогов испускания и поглощения фононов, где, как известно [2], следует ожидать эффектов нетривиального характера. В случае анизотропного спектра, в особенности когда одна из масс в законе дисперсии отрицательна, существует целая область пороговых точек. Как мы покажем, в отличие от случая изотропного квадратичного закона дисперсии появляется порог поглощения фононов, и, наконец, возникает особенность, связанная с невозможностью испускания фонона вдоль некоторых направлений.

Примем, как и в [1], что в некоторой окрестности радиуса Q закон дисперсии имеет вид:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = (1/2m)(\mathbf{p}_t^2 - \gamma \mathbf{p}_z^2). \qquad (1)$$

Здесь обозначения — те же, что и в [1], и считается, что $Q/ms \gg 1$, s — скорость звука.

В точке порога должны выполняться следующие соотношения [3]:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = sq + \varepsilon(\mathbf{p} - q), \qquad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}\{sq+\varepsilon(\mathbf{p}-\mathbf{q})\}=0. \tag{2a}$$

Наличие порога означает, что правая часть (2) как функция $\mathbf{q}$ должна иметь минимум при некотором $\mathbf{p}_c$ и $\varepsilon_c \equiv \varepsilon(p_c)$. В общем случае условие (2а) определяет лишь экстремальные точки поверхности, определяемой правой частью (2). Конкретный тип каждой из этих точек зависит от знака дифференциала второго порядка в ее окрестности. Легко видеть, что в случае квадратичного спектра этот знак совпадает со знаком $\varepsilon(\mathbf{q}_c)$, где $\mathbf{q}_c$ — точка экстремума, определяемая из (2а). Следовательно, в случае спектра (1) все экстремальные точки — седловые, что, однако, отнюдь не означает отсутствия пороговых особенностей. Дело в том, что, аналогично [3], существует дополнительное условие, ограничивающее возможные значения $\mathbf{q}$ в (2а). Экстремальные $\mathbf{q}$ должны быть решениями уравнения (2), т. е., во всяком случае, $|\mathbf{q}|\geqslant 0$. Таким образом, либо $\mathbf{q}=0$ и существует область вблизи $\mathbf{p}_c$, где правая часть (2) как функция $\mathbf{q}$ не убывает, либо $\mathbf{q}\neq 0$ и $\varepsilon(\mathbf{q}_c)$ — положительно определенная квадратичная форма. Тогда собственно порогом будет ближайшая к началу координат в импульсном пространстве особенность (при фиксированных $\mathbf{p}_t$ или p_z). Следует заметить, что для анизотропного спектра (2) и (2а) определяют лишь четыре из шести неизвестных ($\mathbf{q}$ и $\mathbf{p}$), а следовательно, существует целая область пороговых особенностей.

Из сказанного ясно, что в нашем случае пороговая особенность соответствует точке $\mathbf{q}=0$. Однако имеется еще и особенность другого типа.

В пороговой особенности (при $\mathbf{p}=\mathbf{p}_c$) скорость электрона равна по абсолютной величине скорости звука, но в отличие от случая квадратичного спектра со скалярной массой, порог этого типа существует не только для процесса испускания, но и поглощения фононов. Для рассматриваемого типа закона дисперсии (1) в определенной области в пространстве квазиимпульсов $\varepsilon(\mathbf{p})<0$, и здесь поведение электрона аналогично поведению дырки. Поэтому порог в поглощении соответствует на «дырочном» языке порогу в испускании фонона дыркой.

Положение соответствующей особенности дается следующими соотношениями:

$$\mathbf{p}_t^2=(ms)^2-\gamma^2 p_t^2, \tag{3}$$

$$\varepsilon_c=ms^2/2-\gamma(1+\gamma)\,p_z^2/2m.$$

Это есть граница, начиная с которой происходит испускание фонона электроном при $\varepsilon_c>0$, либо поглощение — при $\varepsilon_c<0$. Для поглощения $\varepsilon_c>0$ или искускания при $\varepsilon_c<0$ пороговых особенностей нет (разумеется, кроме точки начала спектра).

Второй тип особенностей, возникающих также при $\mathbf{q}=0$, характерен лишь для спектра (1). Эта особенность возникает из-за того, что электрон может испустить или поглотить фонон с квазиимпульсом $\mathbf{q}$, параллельным изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{p})=0$ лишь при значениях $\mathbf{p}_t$ и p_z, связанных условием

$$\pm\sqrt{1+\gamma}\pm p_t\sqrt{\gamma}\pm\gamma p_z=0, \tag{4}$$

$$q=\frac{p_t\pm\gamma^{3/2}p_z}{2\sqrt{\gamma}\sqrt{1+\gamma}}\,[1+\operatorname{sgn}(p_t-\gamma^{3/2}p_z)]. \tag{4a}$$

Для первого члена верхний знак соответствует испусканию, нижний — поглощению фонона; для второго и третьего членов знаки плюс соответствуют испусканию или поглощению фонона под углом $\psi_0=$ $=\operatorname{arctg}(1/\sqrt{\gamma})$, знаки минус — симметричному относительно начала координат случаю. Заметим, что все перечисленные типы особенностей соответствуют экстремумам $\varepsilon(\mathbf{q}_c)$.

Ясно, что в зависимости от соотношения между γ и Q/ms все типы особенностей могут и не реализоваться. Рассмотрим в дальнейшем малые γ ($\gamma \ll (Q/ms)^2$), т. е. почти цилиндрические изоэнергетические поверхности. Тогда при малых энергиях ($\varepsilon < ms^2/2$) мнимая часть массового оператора определяется лишь процессами поглощения реальных фононов (при температурах решетки $T \gg \omega_D$, где ω_D — частота Дебая акустических фононов).

§ 3. Анализ уравнения для массового оператора. Уравнение для массового оператора, полученное в [1] с помощью тождества Уорда для электрон-фононной вершины, имеет вид:

$$M(p_0) = g^2 \frac{Q}{ms}\left(1 - \frac{\partial M}{\partial p_0}\right) \int\limits_0^{Q/ms} \frac{dv}{v - M(v) + i\beta}. \tag{5}$$

Здесь $M(p_0)$ — вклад особой точки в полный массовый оператор электронов; β — мнимая часть массового оператора, обусловленного далекой (по квазиимпульсу) областью зоны Бриллюэна; $g^2 \equiv (2\pi)^{-7} \cdot 2Tg_0^2 m^2 s/(ms^4)$ — безразмерная константа связи. Энергия в единицах $ms^2/2$ отсчитывается от особой точки с учетом сдвижки за счет удаленных областей зоны Бриллюэна. Мы не учитываем зависимость массового оператора от квазиимпульса, поскольку она слабая [1]. Напомним, что в нашем случае в силу малости концентрации электронов причинная функция Грина совпадает с запаздывающей.

В качестве граничного условия к (4) было использовано соотношение

$$M(0) = 0. \tag{6}$$

Заметим, что $M(p_0)$, по определению, есть вклад особой точки в полный массовый оператор. Поэтому граничное условие к (4) должно определять сшивание нашего решения с решением вдали от особенности. В случае спектра (1) существует область отрицательных энергий, в которой и надлежит производить соответствующее сшивание. Однако при малых γ (см. § 2) вклад этой области в массовый оператор мал, и соответствующее условие можно накладывать при $p_0=0$. В области отрицательных энергий функция Грина есть функция Грина электронов со стандартным законом дисперсии, слабо взаимодействующих с акустическими фононами, а массовый оператор можно вычислить, используя стандартную теорию возмущений по g_0^2 [4].

Как видно из (5) и (6), интеграл в уравнении для M имеет логарифмические особенности как при малых, так и при больших v, поскольку при $v \to \infty$ $M(v)/v \to 0$ [5]. В [1] найдено решение уравнения (5) в предположении, что вкладом в интеграл в (5) от области малых v можно пренебречь. Поскольку, как легко видеть, область малых v дает вклад в интеграл порядка $\ln g^2$, то отбрасывание этих членов по сравнению с членами порядка $\ln Q/ms$ давало ограничение на константу связи g и область применимости полученного решения. Заметим, что само уравнение (5) есть следствие приближенной оценки интегрального члена в точном уравнении для массового оператора (см. Приложение к [1]). Фактически вклад области малых v в интеграл в (5) значительно завышен. Покажем, что пренебрежение вкладом малых v не приводит к появлению новых ограничений на параметры, фигурирующие в задаче. Для этого обратимся к точному уравнению для M:

$$M(p_0) = g^2\left(1 - \frac{\partial M}{\partial p_0}\right)\left\{\int\limits_{k<Q/ms} d^3k\,(p_0 + sk - M(p_0 + sk) - \right.$$

$$\left. - \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{k}) + i\beta)^{-1} + [s \to -s]\right\}. \tag{7}$$

Поскольку в (7) входят лишь полные функции Грина, то интеграл в (7) — собственный и определяется или припороговой областью, (например, при отсутствии поглощения реальных фононов, т. е. $k \sim 0$ — см. § 2), или областью больших $k \sim Q/ms$. Поэтому при $Q/ms \gg 1$ вклад области малых k существен лишь, если он содержит члены, сингулярные по g^2. С другой стороны, при $g^2 \to 0$ массовый оператор должен обращаться в нуль (взаимодействия нет). Отсюда ясно, что члены, сингулярные по g^2 имеют вид $(g^2)^\alpha \ln^\delta g^2$ $(0 \leqslant \alpha \leqslant 1$, δ—любое).

Чтобы выделить особенность при малых k, продифференцируем интеграл в (7) по g^2. Наша задача — показать, что полученное выражение не содержит членов вида $(g^2)^{-\eta}$, где $\eta \leqslant 1$. Аналогично [1] можно получить, что соответствующая производная дается следующим интегралом:

$$I = -\int\limits_{v \sim 0} v^2 dv\,\frac{\partial M(v)}{\partial g^2} \times (v - M(v) + i\beta)^2. \tag{8}$$

Предположим далее, что решение, полученное в [1], а именно:

$$M(p_0) = \theta(p_0)\,g^2(Q/ms)\,[\ln(Q/ms) - i\pi]\left\{1 - \exp\left[-\frac{p_0}{g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)}\right]\right\} \tag{9}$$

справедливо при $p_0 < g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)$. Разложим (9) в ряд по p_0 и подставим в (8), тогда получим

$$I \approx -\int\limits_{v \sim 0} \frac{v^2 dv}{[v^2 + i\beta g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)]^2} \approx O(1). \tag{10}$$

Таким образом, вклад припороговой области не содержит сингулярностей по g^2, и, следовательно, при $(Q/ms) \gg 1$ интеграл в (7) определяется лишь областью больших v, а решение (9) справедливо при любых $p_0 \geqslant 0$. То, что область малых энергий дает малый вклад в интеграл в (7), физически вполне понятно. Области малых v в (5) соответствует член в (7), описывающий испускание фононов. Если отбросить область больших v (поглощение фононов), то при $p_0 < 1$ мы получим задачу о поляроне, в которой хорошо работает теория возмущений. При $p_0 \sim 1$ мы получили бы задачу о пороге испускания акустических фононов, что дало бы слабую особенность в массовом операторе [2]. Поэтому в наших условиях мнимая часть массового оператора формируется в основном процессами поглощения реальных фононов.

§ 4. Электрон-фононная вершина. Используя тождество Уорда [6], получим для вершины с нулевым переданным импульсом

$$\Gamma(p_0, 0) = \left[1 - \exp\left[-\frac{p_0}{g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)}\right]\right]\theta(p_0). \tag{11}$$

Оценим параметр сходимости ряда для $\Gamma(p_0, 0)$ при малых p_0:

$$\zeta \sim G^2\Gamma^2 DB. \tag{12}$$

Здесь G — «одетая» функция Грина, Γ — полная вершина, D — фононная функция Грина; B — величина, характеризующая размер существенной области в пространстве квазиимпульсов. Оценка, аналогичная (10), дает (см. Приложение)

$$\zeta \sim \frac{1-i}{\ln(Q/ms)}, \quad |\zeta| < 1. \tag{13}$$

Заметим, что при малых p_0 параметр ζ имеет конечную мнимую часть. Следовательно, ряд для Γ оказывается знакопеременным и затравочная вершина может быть скомпенсирована. Как видно из (11), $\Gamma(p_0; 0) \longrightarrow 0$ при $p_0 \longrightarrow 0$, что связано со слабым взаимодействием медленного электрона с быстро осциллирующими ионами.

§ 5. **Спектр и плотность состояний.** Таким образом, функция Грина имеет вид

$$G^{-1} = p_0 - \mathbf{p}_t^2/2m - g^2Q/ms\,[\ln(Q/ms) - i\pi] \times \\ \times \left\{1 - \exp\left[-\frac{p_0}{g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)}\right]\right\}. \tag{14}$$

Из (14) видно, что при $\beta < p_0 < g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)$ спектр имеет вид:

$$p_0 = \sqrt{g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)}\, p_t. \tag{15}$$

При $p_0 < \beta$ спектр неопределен. Отметим, что мы считаем

$$\beta < g^2(Q/ms)\ln(Q/ms). \tag{16}$$

Условие (16) означает, что особенность проявляется достаточно сильно. Действительно, неравенство (16) есть условие того, что область вблизи особой точки дает основной вклад в плотность состояний при соответствующей энергии.

Для плотности состояний получим линейное убывание при $p_0 \longrightarrow 0$:

$$\rho(p_0) \approx \rho_0(p_0)\left\{1 - \exp\left[-\frac{p_0}{g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)}\right]\right\} \tag{17}$$

Здесь $\rho_0(p_0)$ есть затравочная плотность состояний в случае закона дисперсии (1).

Автор глубоко признателен В. Л. Бонч-Бруевичу за постоянное внимание и помощь в работе.

ПРИЛОЖЕНИЕ

При $p_0 < g^2(Q/ms)\ln(Q/ms)$ можно разложить (9) в ряд до квадратичных по p_0 членов. Тогда

$$G^2 \sim \frac{g^4[(Q/ms)\ln(Q/ms)]^2}{[p_0^2 + ig^2\beta(Q/ms)\ln(Q/ms)]^2}, \tag{I}$$

$$\Gamma^2 \sim p_0^2/g^4\,[(Q/ms)\ln(Q/ms)]^2. \tag{II}$$

(I) имеет резкий максимум $\sim [g^2\beta(Q/ms)\ln(Q/ms)]^{-1}$, шириной порядка $\Delta p_0 \sim \sqrt{g^2\beta(Q/ms)\ln(Q/ms)}$. Поэтому при малых p_0 (ср. с (15)):

$$B \sim (Q/ms)\left(\frac{\Delta p_0}{g\sqrt{(Q/ms)\ln(Q/ms)}}\right)^2 \sim (Q/ms)\,\beta. \tag{III}$$

Отсюда $|\zeta| \sim \ln^{-1}(Q/ms)$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дрожжов Ю. П. Массовый оператор электронов, взаимодействующих с акустическими фононами в окрестности особой точки Ван Хова.— Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон., 1979, 20, № 4, 13—22.
2. Питаевский Л. П. О свойствах спектра элементарных возбуждений вблизи порога распада возбуждений.— ЖЭТФ, 1959, 36, 1168—1177.
3. Ландау Л. Д. Об аналитических свойствах вершинных частей в квантовой теории поля.— ЖЭТФ, 1959, 37, 62—71.
4. Бонч-Бруевич В. Л., Тябликов С. В. Метод функций Грина в статистической механике. М., 1961, 420 с.
5. Бонч-Бруевич В. Л. Спектральные представления массового и поляризационного оператора при произвольных температурах.— ДАН СССР, 1962, 147, 1049—1051.
6. Engelsberg S., Schrieffer J. R. Coupled Electron—Phonon System.— Phys. Rev., 1963, 131, 993—1008.

Поступила в редакцию
31.05.78

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1980, Т. 21, № 2

УДК 535:534.222

В. А. ВЫСЛОУХ, К. Д. ЕГОРОВ, В. П. КАНДИДОВ

О ВОЗМОЖНОСТИ АМПЛИТУДНОЙ КОМПЕНСАЦИИ ТЕПЛОВОЙ САМОДЕФОКУСИРОВКИ СВЕТОВОГО ПУЧКА (ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ)

При распространении светового пучка в слабопоглощающей среде в его канале индуцируется «тепловая линза», обусловленная зависимостью показателя преломления n от температуры T. В случае $\frac{\partial n}{\partial T}<0$ это вызывает дефокусировку и смещение пучка, если среда движется в плоскости, перпендикулярной направлению распространения. В результате интенсивность на первоначальной оси пучка убывает значительно быстрее, чем в линейной среде.

Для регулярной среды с известными параметрами влияние тепловой дефокусировки можно уменьшить заданием соответствующего начального профиля пучка. Это осуществляется выбором фазового фронта (фазовая компенсация) или профиля интенсивности (амплитудная компенсация). В первом случае пучок предварительно проходит тонкую линзу, которая дополнительно фокусирует и отклоняет его так, чтобы в точке наблюдения скомпенсировать действие нелинейной рефракции. Во втором случае пучок в начале своего распространения индуцирует такую тепловую линзу, которая в некоторой области поперечного сечения действует как фокусирующая.

В настоящей работе численно исследуются возможности амплитудной компенсации теплового самовоздействия в неподвижной и движущейся средах, а также при сканировании пучка. В качестве вычислительного алгоритма использован метод конечных элементов [1, 2].

Распространение пучка в условиях стационарного теплового самовоздействия может быть описано уравнением квазиоптики [3]

$$2ik\frac{\partial E}{\partial z}=\triangle_{\perp}E+k^2\frac{2}{n_0}\frac{\partial n}{\partial T}TE, \qquad (1)$$

где E, k — комплексная амплитуда поля и его волновой вектор.