Письма в ЖЭТФ, том 32, вып.1, стр. 30 – 33 *5 июля 1980 г.*

ВОЛЬТ-АМПЕРНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ С УЗКИМИ РАЗРЕШЕННЫМИ ЗОНАМИ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А.А.Гоголин

С помощью решения уравнений Фоккера – Планка вычислена вольт-амперная характеристика $j(E)$ для электронов с узкими разрешенными зонами при низких температурах. В зависимости $j(E)$ обнаружен характерный максимум.

В связи с экспериментальными исследованиями подвижности электронов в молекулярных кристаллах [1] при наличии сильного электрического поля возникает необходимость теоретического анализа кинетики электронов с узкими разрешенными зонами. В настоящей работе вычислена подвижность электрона, взаимодействующего с акустическими фононами, при температуре $T << \omega_D$ (ω_D — дебаевская частота фононов) и произвольном электрическом поле E . Предполагается, что ширина разрешенной зоны $M << \omega_D$.

Как хорошо известно из теории поляронов малого радиуса [2] в узкозонных системах линейное по смещениям электрон-фононное взаимодействие оказывается сильно подавленным в меру малости параметра $M / \omega_D << 1$. В этих условиях доминирующую роль начинает играть квадратичное взаимодействие, которое не содержит такой малости. Это обстоятельство уже отмечалось в работе Рашба [7] в связи с кинетикой молекулярных экситонов. Гамильтониан квадратичного взаимодействия имеет вид

$$H_{int} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{n}} \psi_n^+ \psi_n \gamma_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} e^{i\mathbf{n}(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2)} (b_{\mathbf{q}_1} + b^+_{-\mathbf{q}_1})(b_{\mathbf{q}_2} + b^+_{-\mathbf{q}_2}). \tag{1}$$

Для акустических фононов константа взаимодействия $\gamma_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} = C_2 \sqrt{q_1 q_2} / 2M_1 s$, где C_2 — соответствующий деформационный потенциал , M_1 — масса элементарной ячейки, а s — скорость звука. Здесь и далее рассматривается простая кубическая решетка с периодом $a = 1$. Вследствие условия $M << \omega_D$ скорость электрона v мала по сравнению с s , и поэтому однофононные и двухфононные процессы испускания и поглощения запрещены законами сохранения. Таким образом, при низких температурах имеет место лишь комптоновское рассеяние фононов на электроне, которому в гамильтониане (1) соответствуют члены типа $b^+_{\mathbf{q}_1} b_{\mathbf{q}_2}$. Сравнение соответствующей вероятности рассеяния с вкладом линейного взаимодействия показывает, что квадратичное электрон-фононное взаимодействие доминирует в узкозонных системах при условии $MC_1^2 / C_2 \omega_D << 1$, где C_1 — деформационный потенциал для линейного взаимодействия.

При низких температурах $T << \omega_D$ вероятность рассеяния электрона мала и его подвижность описывается кинетическим уравнением. Выполнение условий $T << \omega_D$ и $M << \omega_D$ приводит к тому, что тепловые импульсы фононов $q \sim T/s$ малы в сравнении с импульсом электрона p . Поэтому интеграл столкновений может быть разложен по $q / p << 1$, и кинетическое уравнение переходит в уравнение Фоккера — Планка [3] . Для рассматриваемой системы это уравнение принимает вид

$$\mathbf{E} e \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left(\mathbf{A} f + B \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f \right), \tag{2}$$

где e — заряд электрона, а величины A_a и B определяются соотношениями

$$B = \frac{(2\pi)^5}{60} \omega_D q_D^8 \left(\frac{C_2}{M_1 s^2} \right)^2 \left(\frac{T}{\omega_D} \right)^9, \quad A_a = \frac{1}{T} v_a B, \quad a = x, y, z. \tag{3}$$

Здесь $q_D = \omega_D / s$ — дебаевский импульс фононов, а v_a — скорость электрона. Функция распределения $f(\mathbf{p})$ должна удовлетворять периодическим граничным условиям и условию нормировки.

В случае одномерного электрона уравнение (2) легко решается при произвольном спектре $\epsilon(\mathbf{p})$ (фононный спектр по-прежнему предполагается трехмерным). Для этого достаточно сделать замену $f(\mathbf{p}) = X(\mathbf{p}) \exp(-\epsilon(\mathbf{p})/T)$ и фурье-преобразование. В результате выражение для тока $j(E)$ принимает вид

$$j(E) = Te\,\phi_0(E/E_0), \quad E_0 = B/e, \quad \phi_0(x) = \phi_1(x)/\phi_2(x), \tag{4}$$

$$\phi_1(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{im}{im - x} A_m B_m^*, \quad \phi_2(x) = \sum_{-\infty}^{\infty} \frac{A_m B_m^*}{im - x}, \tag{5}$$

где A_m и B_m — фурье-компоненты от $\exp(\epsilon(p)/T)$ и $\exp(-\epsilon(p)/T)$ соответственно. Если свободное движение электрона описывается приближением сильной связи, то $\epsilon(p) = -2M\cos p$ и величины A_m, B_m определяются соотношениями

$$A_m = (-1)^m B_m = (-1)^m I_m(\beta), \quad \beta = 2M/T, \tag{6}$$

где I_m — модифицированные функции Бесселя. Графики зависимости $j(E)/j_0$ ($j_0 = 2Me$) при $\beta = 0{,}2;\ 2;\ 4$ изображены на рисунке. В ней имеется характерный максимум при $E = 1{,}1\,E_0$. Отметим, что его положение не зависит от β. В области $E \ll E_0$ $j(E) \backsim E/E_0$. Поэтому в слабых полях подвижность электрона μ имеет вид

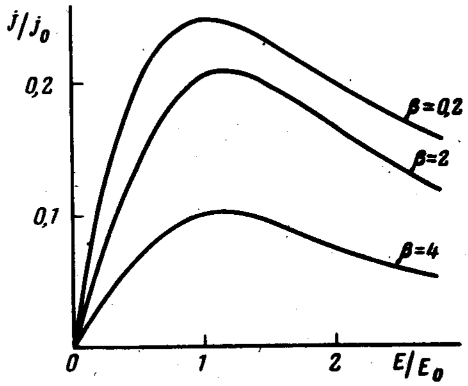
$$\mu(T) = \frac{T}{eE_0}\,\frac{I_0^2(\beta) - 1}{I_0^2(\beta)}. \tag{7}$$

При $M \ll T$ $\mu(T) = \beta^2 T/2eE_0 \backsim T^{-10}$. Эта асимптотика была получена другим методом в работах Кагана и др. [4, 5].

В области $E \gg E_0$ $j(E) \backsim E_0/E$. Убывание $j(E)$ в сильных полях приводит к отрицательной дифференциальной проводимости. Механизм убывания $j(E)$ в сильных полях тот же, что и в работе Келдыша [6]. Отметим, что характерное поле E_0, при котором возникает сильная нелинейность, быстро убывает с понижением температуры ($E_0 \backsim T^8$). Это позволяет надеяться на возможность экспериментального наблюдения сильной нелинейности уже при температурах $T \sim 10$ К.

В приближении сильной связи спектр электрона в тетрагональной кристаллической решетке имеет вид

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \sum_a \epsilon_a(p_a). \tag{8}$$



Вольт-амперная характеристика при $\beta = 0{,}2;\ 2;\ 4$.

В этом случае переменные в уравнении (2) разделяются и поэтому все результаты, полученные для одномерной задачи, непосредственно обобщаются на системы любой размерности. Это позволяет использовать простые формулы (4) – (6) для описания зависимости $j(E)$ в молекулярных кристаллах. При этом компонента тока j_a вдоль оси a в поле E_a определяется выражениями (4), (5), в которые надо подставить $E = E_a$ и $\epsilon(p) = \epsilon_a(p_a)$. Отметим, что все полученные результаты справедливы для любых узкозонных квантовых частиц и могут, в частности, описывать туннелирование легких ионов в кристаллической решетке.

В заключение автор выражает благодарность Э.И.Рашба, Ю.М.Кагану, И.Б.Левинсону и Л.А.Максимову за полезное обсуждение результатов работы.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
13 мая 1980 г.

Литература

[1] L.B.Schein, A.R.McGhie. Chem. Phys. Lett., 62, 356, 1979.

[2] Ю.А.Фирсов. Сб. "Поляроны", М., изд. Наука, 1975.

[3] Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. Физическая кинетика, М., изд. Наука, 1979.

[4] Ю.М.Каган, Л.А.Максимов. ЖЭТФ, 65, 622, 1973.

[5] Ю.М.Каган, М.И.Клингер. J.Phys. C., 7, 2791, 1974.

[6] Л.В. Келдыш. ЖЭТФ, 43, 661, 1962.

[7] Э.И.Рашба. ЖЭТФ, 50, 1064, 1966.