Письма в ЖЭТФ, том 20, вып. 1, стр. 63 – 67 *5 июля 1974 г.*

НЕЛИНЕЙНОЕ ПОЛЯРИЗАЦИОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОНОВ С КОРОТКОВОЛНОВЫМИ ФОНОНАМИ

И.Б.Левинсон, Э.И.Рашба

Пара коротковолновых фононов с малым полным импульсом порождает электрическое макрополе. Электрон-фононное взаимодействие, обусловленное этим полем, оказывается весьма значительным.

Последние эксперименты по пиннингу и комбинационному рассеянию (см., например, [1 – 3]), в которых обнаруживается большой вклад двухфононных процессов, возродили интерес к нелинейному электрон-фононному взаимодействию. Величина этого взаимодействия долгое время считалась незначительной, после того как были установлены определенные механизмы его сокращения [4 – 6]. Гигантские нелинейные деформационные потенциалы ($D_2 \sim 10^5 \div 10^6$ *эв*), введенные недавно [7] для объяснения результатов [1], получены без учета предостережений Херинга [6] и уже опровергнуты экспериментально [3].

Ниже мы рассматриваем новый механизм нелинейного взаимодействия – поляризационное нелинейное электрон-фононное взаимодействие, и показываем, что в ряде случаев оно должно оказаться доминирующим.

Существо дела состоит в том, что в полупроводниках обычно важны процессы с малой передачей электронного импульса $|\Delta\mathbf{p}| << p_B$, где p_B – бриллюэновский импульс. Применительно к двухфононным процессам это означает, что полная передача фононного импульса $|\mathbf{q}_1 \pm \mathbf{q}_2| << p_B$, хотя импульсы отдельных фононов $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ могут иметь при этом произвольную величину (обычно $q_1, q_2 \sim p_B$). В таких условиях каждый из фононов может порождать лишь микрополе с периодом $q_1^{-1} \sim q_2^{-1} \sim a$ (a – постоянная решетки), но длинноволновая комбинация двух фононов должна порождать нелинейную диэлектрическую поляризацию и макрополе с периодом $|\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2|^{-1} >> a$. Продольная компонента этого макрополя должна сильно взаимодействовать с электронами. Ранее нами была рассмотрена [8] в известном смысле родственная ситуация: два TO-фонона порождают продольное макрополе, хотя каждый из них в отдельности несет только поперечное.

Прямым указанием на наличие нелинейного макрополя является экспериментальный факт активности различных комбинаций коротковолновых фононов с $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 \approx 0$ в инфракрасном поглощении [9, 10]. Конечно, такая активность непосредственно доказывает только наличие поперечного макрополя. Однако в кубическом кристалле все три компоненты макроскопического дипольного момента преобразуются по одному представлению; поэтому из существования поперечного макрополя для определенной комбинации фононов следует и существование продольного.

Произведем порядковые оценки. Заряд, наведенный на атоме смещением $\mathbf{u}_1$, отвечающим фонону $\mathbf{q}_1$, имеет порядок eu_1/a; поэтому атомный дипольный момент, порождаемый смещением $\mathbf{u}_2$, отвечающим $\mathbf{q}_2$, порядка eu_1u_2/a. В результате плотность дипольного момента $P \sim eu_1u_2/a^4$, скалярный потенциал $\phi \sim P/q$ ($\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$), а гамильтониан нелинейного поляризационного взаимодействия символически записывается как

$$H_2^P = e\phi \sim \frac{e^2}{a^4}\,\frac{u^2}{q} \sim \frac{E_0}{aq}\left(\frac{u}{a}\right)^2, \quad E_0 \sim \frac{e^2}{a} \sim 10\ \text{эв}. \quad (1)$$

Гамильтонианы нелинейного деформационного, а также линейного взаимодействия обоих видов представим как

$$H_2^D \sim E_0\left(\frac{u}{a}\right)^2, \quad H_1^P \sim \frac{E_0}{aq}\,\frac{u}{a}, \quad H_1^D \sim E_0\,\frac{u}{a}. \qquad (2)$$

Из (1) и (2) видно, что $H_2^P/H_2^D \sim (aq)^{-1} >> 1$ во всех случаях, когда доминируют переходы с малым q.

Эффективность разных взаимодействий можно оценить по вероятности электронного рассеяния w. Чтобы окончательные формулы содержали меньше параметров, удобно считать тепловую энергию и энергии электрона и фонона одного порядка $kT \sim \hbar\omega_0 \sim p^2/2m$. Тогда из (1) и (2) следует

$$w_1^P \sim \mu^{-1}\omega_0, \quad w_1^D \sim w_2^P \sim \mu\,\omega_0, \quad w_2^D \sim \mu^3\omega_0, \tag{3}$$

где адиабатпараметр $\mu \sim (m/M)^{1/4} \sim (\hbar\omega_0/E_0)^{1/2}$. Видно, что нелинейное поляризационное взаимодействие доминирует над нелинейным деформационным и сравнимо с линейным деформационным взаимодействием. Конечно, такие оценки не нужно понимать слишком буквально. Это видно из того, что в w_1^P вместо μ^{-1} фактически входит фрелиховская константа связи a, причем обычно $a \lesssim 1$. Поэтому мы ниже представим H_2^P в терминах величин, которые можно непосредственно оценить, используя данные по двухфононному решеточному поглощению.

Нелинейную решеточную поляризацию представим в виде:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2V}\sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\sigma\tau} g_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)\, B_\sigma(\mathbf{q}_1)\, B_\tau(\mathbf{q}_2)\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

$$B_\sigma(\mathbf{q}_1) = b_\sigma(\mathbf{q}_1) + \overset{+}{b}_\sigma(-\mathbf{q}_1); \tag{4}$$

σ, τ нумеруют ветви фононного спектра, V – нормировочный объем, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2$. Согласно оценке (1) коэффициенты $g \sim \hbar\omega_0 a^2/e$. При $q \ll p_B$ справедливо $g_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2) \approx g_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1)$.

Тогда стандартный расчет дает применительно к кубическим кристаллам следующую формулу для двухфононного поглощения:

$$\epsilon''(\omega) = \frac{1}{6\pi\hbar}\, G^2(\omega)\,\rho(\omega), \tag{5}$$

где $\rho(\omega)$ – плотность состояний

$$\rho(\omega) = \sum_{\sigma\tau}\int d^3\mathbf{q}_1\,\delta(\omega - \omega_\sigma(\mathbf{q}_1) - \omega_\tau(-\mathbf{q}_1)), \tag{6}$$

а $G^2(\omega)$ – среднее от $|g_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1)|^2$ по изоэнергетическим поверхностям $\omega_\sigma(\mathbf{q}_1) + \omega_\tau(-\mathbf{q}_1) = \omega$.

С другой стороны, вычисляя скалярный потенциал, создаваемый поляризацией $\mathbf{P}(\mathbf{r})$, находим

$$H_2^P = \frac{2\pi e}{iV}\sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\sigma\tau}\frac{(\mathbf{q}g_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1))}{q^2}\, B_\sigma(\mathbf{q}_1)\, B_\tau(\mathbf{q}_2)\, e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \tag{7}$$

Для сравнения удобно ввести нелинейный деформационный потенциал $D_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2)$ согласно

$$H_2^D = \frac{u_0^2 a}{2V} \sum_{\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2\sigma\tau} D_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2) B_\sigma(\mathbf{q}_1) B_\tau(\mathbf{q}_2) e^{i\,\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad u_0^2 = \hbar/M\omega_0, \qquad (8)$$

где ω_0 – характерная фононная частота, a^3 – объем ячейки, а M – атомная масса. Из (7) и (8) следует, что соотношение между величиной деформационного и поляризационного взаимодействия определяется сравнением $D_{\sigma\tau}$ с

$$D^*_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1\mathbf{q}_2) = \frac{4\pi e}{i\,u_0^2 a} \frac{1}{q^2} (\mathbf{q}\mathbf{g}_{\sigma\tau}(\mathbf{q}_1)). \qquad (9)$$

Используя экспериментальные данные по двухфононному поглощению в Ge [9] вблизи 30 *мк* и формулы (5), (6) и (9), нетрудно получить оценку $D^*(q) \sim 10^3$ *эв*$/qa$.

В комбинационном рассеянии существенны виртуальные переходы с рождением электронно-дырочных пар или экситонов. Из-за их электронейтральности главные члены $\propto q^{-1}$ сокращаются, что эквивалентно замене qa на величину порядка единицы [11]. Получающиеся при этом $D^* \sim 10^3$ *эв* близко к величинам констант деформационного потенциала, полученным экспериментально в [3].

Заметим в заключение, что линейное электрон-фононное взаимодействие, взятое во втором порядке теории возмущений, не приводит к особенностям при $q \to 0$, и поэтому для нелинейного поляризационного взаимодействия не возникает ничего аналогичного холстейновской компенсации [4].

Авторы благодарны Г.Е.Пикусу за ценную дискуссию.

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

Поступила в редакцию
3 июня 1974 г.

Литература

[1] K.L.Ngai, E.J.Johnson. Phys. Rev. Lett., 29, 1607, 1972.
[2] В.И.Иванов-Омский, Е.М.Шерегий. ФТТ, 16, 238, 1974.
[3] B.A.Weinstein, M.Cardona. Phys. Rev., 8, B2795, 1973.
[4] T.Holstein. Phys. Rev., 113, 479. 1959.
[5] G.D.Whitfield. Phys. Rev. Lett., 2, 204, 1959.
[6] C.Herring. Proc. of the Intern. Conf. on Semiconductor Physics, Prague, 1960, p. 60.
[7] P.J.Lin-Chung, K.L.Ngai. Phys. Rev. Lett., 29, 1610, 1972.
[8] И.Б.Левинсон, Э.И.Рашба. ЖЭТФ, 62, 1502, 1972.

[9] E.Burstein, J.J.Oberly. Phys. Rev., 78, 642, 1950; M.Lax, E.Burstein. Phys. Rev., 97, 39, 1955.

[10] М.Борн, Х.Кунь. Динамическая теория кристаллических решеток, М., ИИЛ, 1958.

[11] R.Loudon. Proc. Roy. Soc., 275, 218, 1963.