Письма в ЖЭТФ, том 62, вып.3, стр.227 - 230

РЕЗОНАНС ФАНО В СИСТЕМЕ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ

Л.А.Фальковский

Институт теоретической физики им.Л.Д.Ландау РАН
117 334 Москва, Россия

Поступила в редакцию 6 июля 1995 г.

Рамановское рассеяние с возбуждением фонона рассматривается в условиях, когда оно обусловлено взаимодействием света с электронами проводимости. Линия имеет форму антирезонанса Фано. Учтена экранировка электрон-фотонного взаимодействия и деформационного потенциала за счет кулоновского взаимодействия электронов. Сравнением с экспериментом оценены параметры линии 350 см$^{-1}$ и электрон-фононная константа в сверхпроводящем YBaCuO.

1. Резонансом Фано обычно называют узкий резонанс, наблюдаемый на фоне достаточно размытого континуума. Мы рассмотрим здесь резонанс в неупругом рассеянии света в металлах с возбуждением или поглощением фонона. Соответствующий континуум связан с рассеянием света электрон-дырочными парами. Если принять во внимание электрон-фононное взаимодействие, то узкий резонанс потеряет лоренцовскую форму. Несимметричная форма линии – характерный признак резонанса Фано. Такие линии часто наблюдаются на эксперименте [1–3] и существует несколько теорий [4–6], объясняющих их форму.

Обычно используется квантовомеханический подход и рассматривается наиболее простой случай, когда можно пренебречь пространственной дисперсией. Однако соответствующее условие $kv << |\omega + i/\tau|$ ($v \simeq 10^8$ см/с – фермиевская скорость, τ^{-1} – частота столкновений электронов, k и ω – характерные волновой вектор и частота) выполнено далеко не всегда. Например, для рассеяния света волновой вектор $k \simeq \omega_p/c$, где $\omega_p \simeq 3\cdot 10^{15}$с$^{-1}$ – плазменная частота электронов. Если при этом возбуждается оптический фонон с частотой ω_D, то частота столкновений

$$\tau^{-1} \simeq 2\pi g \max(\omega_D, T), \tag{1}$$

где дебаевская частота $\omega_D \simeq 3\cdot 10^{13}$с$^{-1}$. Положив безразмерную константу электрон-фононного взаимодействия $g \sim 0,5$ (мы обсудим в дальнейшем это значение), можно увидеть, что возможна как малая, так и большая пространственная дисперсия.

В работе [6] , где рассматривалась эта задача в длинноволновом пределе, применялся метод функций Грина, что является неоправданно сложным, поскольку переданные волновой вектор $\mathbf{k} = \mathbf{k}^{(i)} - \mathbf{k}^{(s)}$ и частота $\omega = \omega^{(i)} - \omega^{(s)}$ (индексами i и s обозначены соответствующие величины для падающего и рассеянного света в образце) малы по сравнению с фермиевскими импульсом и энергией, и для вычисления отклика, через мнимую часть которого выражается дифференциальное сечение рассеяния, проще воспользоваться классическим кинетическим уравнением [7, 8].

2. Мы вычислим отклик электронной системы, взаимодействующей с фононами, на возмущение $\gamma(\mathbf{p})U(\mathbf{k},\omega)$, где $\gamma(\mathbf{p}) = e_\alpha^{(i)}\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{p})e_\alpha^{(s)}$ билинейна по

векторам поляризации падающего и рассеянного света, а $\gamma_{\alpha\beta}(\mathbf{p})$ учитывает как внутризонные, так и межзонные виртуальные переходы [9].

Принимая во внимание взаимодействие электронов с полем $U(\mathbf{k},\omega)$, а также с акустическим $u(\mathbf{k},\omega)$ и оптическим $w(\mathbf{k},\omega)$ колебаниями, запишем изменение электронной энергии в виде

$$\varepsilon(\mathbf{p},\mathbf{k},\omega) = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \gamma(\mathbf{p})U(\mathbf{k},\omega) + \lambda_{jk}(\mathbf{p})u_{jk}(\mathbf{k},\omega) + \xi_j(\mathbf{p})w_j(\mathbf{k},\omega), \tag{2}$$

где $\lambda_{jk}(\mathbf{p})$ и $\xi_j(\mathbf{p})$ – соответствующие деформационный потенциал и сдвиговое поле.

Можно убедиться [8], что кулоновское взаимодействие электронов и "столкновительная" часть их взаимодействия с примесями и фононами экранируют все затравочные вершины так, что должна быть произведена замена:

$$\gamma(\mathbf{p}) \to \gamma(\mathbf{p}) - <\gamma(\mathbf{p})> / <1>, \quad \lambda_{ik}(\mathbf{p}) \to \lambda_{ik}(\mathbf{p}) - <\lambda_{ik}(\mathbf{p})> / <1>,$$

$$\xi_i(\mathbf{p}) \to \xi_i(\mathbf{p}) - <\xi_i(\mathbf{p})> / <1>, \tag{3}$$

где угловыми скобками обозначено интегрирование по ферми-поверхности. После такой замены кулоновское взаимодействие можно не рассматривать вплоть до частот $\omega < \omega_p$, а интеграл столкновений записывать в приближении времени релаксации.

Решая кинетическое уравнение, для электронной функции распределения находим

$$f_p(\mathbf{k},\omega) = f_0(\varepsilon_0) + \Pi(\mathbf{vk},\omega)\left(\varepsilon(\mathbf{p},\mathbf{k},\omega) - \varepsilon_0(\mathbf{p})\right)\frac{df_0}{d\varepsilon_0}, \tag{4}$$

где

$$\Pi(\mathbf{vk},\omega) = \frac{i\tau^{-1} - \mathbf{vk}}{\omega + i\tau^{-1} - \mathbf{vk}}, \tag{5}$$

f_0 – фермиевская функция. Подставляя это выражение в уравнение движения фононов, например оптических, получаем

$$\left(\omega^2(\mathbf{k}) - \omega^2 - \Gamma(\mathbf{k},\omega)\right) w(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\rho} <\gamma(\mathbf{p})\xi(\mathbf{p})\Pi(\mathbf{vk},\omega)> U(\mathbf{k},\omega), \tag{6}$$

где

$$\Gamma(\mathbf{k},\omega) = \frac{1}{\rho} <\xi^2(\mathbf{p})\Pi(\mathbf{vk},\omega)>, \tag{7}$$

ρ – приведенная масса элементарной ячейки, и мы для краткости опускаем векторные индексы, предполагая, что колебание с частотой $\omega(\mathbf{k})$ не связано с другими колебаниями. Вещественная часть Γ описывает сдвиг частоты, мнимая – затухание оптических фононов.

Выражения (4) – (7) позволяют вычислить отклик $\chi(\mathbf{k},\omega)$ на возмущение $\gamma(\mathbf{p})U(\mathbf{k},\omega)$. Воспользовавшись определением

$$\int \frac{2d^3p}{(2\pi)^3}\gamma(\mathbf{p})\left(f_p(\mathbf{k},\omega) - f_0(\varepsilon_0)\right) = -\chi(\mathbf{k},\omega)U(\mathbf{k},\omega),$$

находим

$$\chi(\mathbf{k},\omega) = <\gamma^2(\mathbf{p})\Pi(\mathbf{vk},\omega)> - \frac{<\gamma(\mathbf{p})\xi(\mathbf{p})\Pi(\mathbf{vk},\omega)>^2}{\rho\left(\omega^2(\mathbf{k}) - \omega^2 - \Gamma(\mathbf{k},\omega)\right)}. \tag{8}$$

Первое слагаемое в (8) представляет вклад электрон-дырочных возбуждений. Его мнимая часть, определяющая сечение неупругого рассеяния света, в предельных случаях малой и большой пространственной дисперсии имеет вид

$$\chi''_{eh}(\mathbf{k},\omega) = \frac{\omega\tau}{(\omega\tau)^2+1} < \gamma^2(\mathrm{p}) > \quad \text{при } kv << |\omega + i/\tau|, \tag{9}$$

$$= (\pi\omega/k) < \gamma^2(\mathrm{p})\delta(\nu)/v > \quad \text{при } kv >> |\omega + i/\tau|, \tag{10}$$

где $\cos\nu = \mathbf{k}\mathbf{v}/kv$, $\delta(\nu)$ – функция Дирака. Подчеркнем, что в (8) – (10) должно быть сделано вычитание (3).

Второе слагаемое – резонанс на частоте $\omega(\mathbf{k})$. Легко увидеть, что мнимая часть этого слагаемого может быть противоположного знака по отношению к мнимой части электрон-дырочного вклада, и только в сумме они имеют, как и должно быть, положительный знак. Отделяя мнимую часть (8), находим при $kv << |\omega + i/\tau|$:

$$\chi''(\mathbf{k},\omega) = \chi''_{eh}(\mathbf{k},\omega)\frac{[\omega^2(\mathbf{k}) - \Gamma' + \omega_0^2 - \omega^2]^2 + A^2}{[\omega^2(\mathbf{k}) - \Gamma' - \omega^2]^2 + \Gamma''^2}, \tag{11}$$

где $\chi''_{eh}(\mathbf{k},\omega)$ дается формулой (9),

$$\Gamma = \frac{1}{\rho} < \xi^2(\mathrm{p}) > \frac{1 + i\omega\tau}{(1+\omega^2\tau^2)}, \tag{12}$$

$$\omega_0^2 = \frac{< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p}) >^2}{\rho < \gamma^2(\mathrm{p}) > (1+\omega^2\tau^2)}, \tag{13}$$

$$A^2 = \left(< \xi^2(\mathrm{p}) > - \frac{< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p}) >^2}{< \gamma^2(\mathrm{p}) >}\right) \cdot \tag{14}$$

$$\cdot \left(\frac{< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p}) >^2}{< \gamma^2(\mathrm{p}) >} + < \xi^2(\mathrm{p}) > \omega^2\tau^2\right)\rho^{-2}(1+\omega^2\tau^2)^{-2}. \tag{15}$$

В коротковолновом пределе $kv >> |\omega + i/\tau|$ получаем выражение типа (11), в котором $\chi''_{eh}(\mathbf{k},\omega)$ дается формулой (10), а остальные обозначения имеют следующий смысл:

$$\Gamma = \frac{1}{\rho}\left(< \xi^2(\mathrm{p}) > + i\pi\frac{\omega}{k} < \xi^2(\mathrm{p})\delta(\nu)/v >\right), \tag{16}$$

$$\omega_0^2 = \frac{< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p}) >< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p})\delta(\nu)/v >}{\rho < \gamma^2(\mathrm{p})\delta(\nu)/v >}, \tag{17}$$

$$A^2 = [< \xi^2(\mathrm{p})\delta(\nu)/v >< \gamma^2(\mathrm{p})\delta(\nu)/v > - < \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p})\delta(\nu)/v >^2] \cdot \tag{18}$$

$$\cdot \frac{< \xi(\mathrm{p})\gamma(\mathrm{p}) >^2}{\rho^2 < \gamma^2(\mathrm{p}\delta(\nu)/v >^2}.$$

Заметим, что мнимая часть Γ'' пропорциональна частоте, и с учетом затухания (если оно мало) и сдвига, обусловленными взаимодействием с электронами, спектр фононов можно записать в виде

$$\omega = \tilde{\omega}(\mathbf{k}) - i\Gamma''/2\omega, \qquad \tilde{\omega}^2(\mathbf{k}) = \omega^2(\mathbf{k}) - \Gamma'.$$

3. Второй множитель в (11) описывает асимметричный резонанс: имеется максимум, расположенный в случае малого Γ'' при $\tilde{\omega}(\mathbf{k})$, и минимум при ω_{min}, определяемой условием $\omega_{min}^2 = \tilde{\omega}^2(\mathbf{k}) + \omega_0^2 + A^2/\omega_0^2$. Таким образом, минимум находится при большей частоте, чем максимум, и это особенно отчетливо видно в сверхпроводящем YBaCuO [2, 3] на двух антирезонансах при 115 см$^{-1}$ и 350 см$^{-1}$. Отличное от нуля A у нас получается только благодаря зависимости вершин $\gamma(\mathbf{p})$ и $\xi(\mathbf{p})$ от импульса. При $A = 0$ сечение рассеяния обращается в нуль на некоторой переданной частоте. Вообще говоря, ненулевое A может быть получено и при учете рассеяния света собственно на фононах – оно возникает, например, в диэлектрике за счет флуктуаций диэлектрической проницаемости и микроскопически может быть описано как результат виртуальных переходов электронов из полностью заполненных зон в пустые. Именно эта ситуация рассматривалась в [6], где отличное от нуля A получается только за счет собственного затухания фононов. Формула (11) при этом сильно усложняется (мы приведем ее в подробной статье) - появляются две дополнительные константы. Ее имело бы смысл здесь обсуждать, если бы существовали экспериментальные данные о рамановском рассеянии при переходе от металлических к диэлектрическим образцам.

Пользуясь формулами (11)–(14), мы описали форму линии резонанса [3] при $\omega^* = 350$ см$^{-1}$ в YBaCuO и определили значения констант: $\Gamma''/2\omega^* = 13$ см$^{-1}$, $\omega_0 \simeq \sqrt{A} = 120$ см$^{-1}$, $\omega^*\tau = 0,30$, а по формуле (1) оценили входящую туда электрон-фононную константу, положив $\omega_D = \omega^*$. Оказалось, что $g = 0,53$. Разумеется, 500 K – подходящее значение для дебаевской температуры в YBaCuO. Сомнительно также, что учет собственного рассеяния, о котором речь шла выше, может сильно изменить значение g, поскольку асимметрия линии весьма заметна.

Проведенное здесь рассмотрение применимо и к мандельштам-бриллюэновскому рассеянию, то есть рассеянию с возбуждением акустического фонона, – надо лишь в формулах (11) – (17) заменить $\xi \to k\lambda$.

В заключение сделаем замечание, касающееся распределения падающего излучения в металле. Приведенные выше формулы относятся к случаю, когда затухание этого поля мало по сравнению с затуханием фонона, и в качестве переданного волнового вектора $\mathbf{k}$ надо брать удвоенный волновой вектор падающего излучения в металле (для геометрии рассеяния назад). Это условие явным образом записано в [8] при выводе формулы (52).

---

1. G.Blumberg et al., Supercond. **7**, 445 (1994).
2. S.L.Cooper, M.V.Klein, B.G.Pazol at al., Phys. Rev. B **39**, 2781 (1989).
3. T.Staufer, R.Hackel, and P.Müller, Solid State Commun. **79**, 409 (1991).
4. U.Fano, Phys. Rev. **124**, 1866 (1961).
5. H.Monien and A.Zawadowski, Phys. Rev. Lett. 63, 911 (1989).
6. T.P.Devereaux, A.Virosztek, and A.Zawadowski, Phys. Rev. B **51**, 505 (1995).
7. L.A.Falkovsky and S.Klama, Phys. Rev. B **50**, 5666 (1994).
8. L.A.Falkovsky and E.G.Mishchenko, Phys. Rev. B **51**, 7239 (1995).
9. M.V.Klein and S.V.Dierker, Phys. Rev. B **29**, 4976 (1984).