

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-05-07U

Якібчук П.М.*, Волков О.В.*

ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА НЕВПОРЯДКОВАНИХ
МЕТАЛІВ З ВРАХУВАННЯМ ДИНАМІЧНИХ
ВЛАСТИВОСТЕЙ ІОННОЇ ПІДСИСТЕМИ

*Львівський Національний університет імені Івана Франка
79005, Україна, Львів, вул. Кирила-Мефодія, 8

ЛЬВІВ

УДК: 532; 533; 533.9:530.182; 536.75; 536-12.01.

PACS: 05.60.+w, 05.70.Ln, 05.20.Dd, 52.25.Dg, 52.25.Fi

Електронна структура неупорядкованих металів з врахуванням динамічних властивостей іонної підсистеми

Якібчук П.М., Волков О.В.

Анотація. В цій роботі запропонована методика розрахунку густини станів неупорядкованих металів, що базується на використанні методу Т-матриць Ллойда в рамках узагальненої теорії Займана. Для врахування впливу динамічних властивостей іонної підсистеми на енергетичну структуру металу розсіяння електрона на іонах розглянуто у непружному випадку з використанням динамічного структурного фактора в моделях Дебая та Ейнштейна.

The electronic structure of disordered metals considering dynamic properties of ionic subsystem

P.M.Yakibchuk, O.V.Volkov

Abstract. Here we present a new method for calculation of the density of states of disordered metals based on Lloyd's method of T-matrixes within generalized Zaiman's theory. Influence of dynamic properties of ionic subsystem on electronic structure of metals is considered within non-elastic scattering approximation responsive to dynamic structure factor of Debye's and Einstein's models.

Подається в Condensed Matter Physics
Submitted to Condensed Matter Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2005
Institute for Condensed Matter Physics 2005

Вступ

Густина одноелектронних станів неупорядкованого металу в методі функцій Гріна визначається:

$$N(E) = -\frac{2}{\pi} SpIm\langle G(E, k) \rangle_{conf} \quad (1)$$

Застосування конфігураційного засереднення $\langle \dots \rangle_{conf}$ обумовлено структурною неупорядкованістю такої системи [1]. Використавши інтегральну густину одноелектронних станів $\aleph(E) = \int N(E) dE$, згідно з формалізмом Ллойда-Займана [2] можна показати, що:

$$\aleph(E) = \aleph_{id}(E) - \frac{2}{\pi} SpImLn\langle T(E) \rangle_{conf} \quad (2)$$

В [1] зазначено, що у випадку неупорядкованого металу співвідношення (2) можна виразити через квадрат узагальненої Т-матриці системи, а саме

$$\aleph(E) = \aleph_{id}(E) - \frac{1}{\pi} SpArg\langle T(E)^2 \rangle_{conf} \quad (3)$$

Використовуючи матричне зображення Т-матриці та наближення слабкої кореляції (слабого зв'язку), яке передбачає слабе перекриття одновузлових потенціалів електрон-іонної взаємодії [1], отримуємо:

$$\begin{aligned} \Delta(E) &= \aleph(E) - \aleph_{id}(E) = \\ &= \frac{1}{\pi} Arctg \frac{\sum_f S^i(|k_f - k_i|) [Imt_{fi}^{ion} Ret_{if}^{ion} + Imt_{if}^{ion} Ret_{fi}^{ion}]}{\sum_f S^i(|k_f - k_i|) [Imt_{fi}^{ion} Imt_{if}^{ion} - Ret_{fi}^{ion} Ret_{if}^{ion}]} \end{aligned} \quad (4)$$

де t_{fi}^{ion} та t_{if}^{ion} – матричний елемент Т-матриці окремого іона, що відповідає переходу з початкового стану до кінцевого; $S^i(|k_f - k_i|)$ – структурний фактор іонної підсистеми.

Перехід від підсумовування за кінцевими станами до інтегрування за кутами розсіяння здійснюється за схемою

$$\sum_f \rightarrow \frac{\Omega}{4\pi} \int_{-1}^1 k^2(x) dx, \quad (5)$$

де x – косинус кута розсіяння; $k_f(x)$ – функція, що описує ізоенергетичну поверхню в просторі імпульсів.

Вважаючи, що при розсіянні обмін енергією між електроном та іоном відсутній (тобто розсіяння відбувається на ізоенергетичній поверхні) з співвідношення (4), отримаємо

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} Arctg \frac{\int_{-1}^1 2S^i(|k_f - k_i|) Imt_E^{ion}(x) Ret_E^{ion}(x) k_f^2 dx}{\int_{-1}^1 S^i(|k_f - k_i|) [Imt_E^{ion}(x)^2 - Ret_E^{ion}(x)^2] k_f^2 dx} \quad (6)$$

У випадку центрально симетричного потенціалу в парціальному наближенні для уявної та дійсної частин Т-матриці матимемо [4]

$$Imt_E^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2E}} \sum_l (2l+1) [1 + \cos 2\delta_l(E)] P_l(x) \quad (7)$$

$$Ret_E^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2E}} \sum_l (2l+1) \sin 2\delta_l(E) P_l(x) \quad (8)$$

Тут $\delta_l(E)$ – парціальні фазові зсуви; $P_l(x)$ – поліноми Лежандра.

Розглянемо імпульсний трикутник розсіяння, побудований на векторах початкового та кінцевого станів. Вважаючи, що $k_f = k_i = \sqrt{2E}$, з співвідношення (6) отримаємо

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} Arctg \frac{2 \int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) Imt_E^{ion}(x) Ret_E^{ion}(x) dx}{\int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) [Imt_E^{ion}(x)^2 - Ret_E^{ion}(x)^2] dx} \quad (9)$$

Тоді густина станів визначатиметься як

$$N(E) = \frac{\Omega\sqrt{2E}}{\pi^2} - \frac{d}{dE} \Delta(E) \quad (10)$$

Непружне розсіяння

Характерною рисою непружного розсіяння є обмін енергією між іонами та електронами. Цей процес можна трактувати так, що в момент розсіяння між іоном та електроном відбувається обмін фононами, тобто мають місце процеси поглинання та народження фононів. В рамках такої моделі енергія електрона в початковому стані відрізняється від енергії в кінцевому стані на величину енергії фонона, що поглинувся або народився. В такому випадку $t_{fi}^{ion} \neq t_{if}^{ion}$. Вважаючи енергію початкового стану E , а кінцевого $F = E + \omega$, для дійсної і уявної частин Т-матриць отримаємо [3]

$$Imt_{E,F}^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2E}} \sum_l (2l+1) [1 + \cos 2\delta_l(E, F)] P_l(x) \quad (11)$$

$$Ret_{E,F}^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2E}} \sum_l (2l+1) \sin 2\delta_l(E, F) P_l(x) \quad (12)$$

$$Imt_{F,E}^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2F}} \sum_l (2l+1) [1 + \cos 2\delta_l(F, E)] P_l(x) \quad (13)$$

$$Ret_{F,E}^{ion}(x) = \frac{2\pi}{\Omega\sqrt{2F}} \sum_l (2l+1) \sin 2\delta_l(F, E) P_l(x) \quad (14)$$

Слід також зауважити, що при цьому $\delta_l(E, F) \neq \delta_l(F, E)$, а відповідна фаза пружного розсіяння визначатиметься як $\delta_l(E) = \delta_l(E, E)$.

Для спрощення запису введемо такі величини (з точністю до множника $\Omega^2/2\pi^2$)

$$\frac{\mathbf{It}(E, \omega, x)}{\sqrt{EF}} = \sum_l [Imt_{E,F}^{ion}(x) Ret_{F,E}^{ion}(x) + Ret_{E,F}^{ion}(x) Imt_{F,E}^{ion}(x)] \quad (15)$$

$$\frac{\mathbf{Rt}(E, \omega, x)}{\sqrt{EF}} = \sum_l [Ret_{E,F}^{ion}(x) Ret_{F,E}^{ion}(x) - Imt_{E,F}^{ion}(x) Imt_{F,E}^{ion}(x)] \quad (16)$$

Тут $\omega = F - E$. Зауважимо, що випадок $\omega = 0$ відповідає процесу пружного розсіяння. Тому (9) можна переписати у вигляді

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \text{Arctg} \frac{\int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) \mathbf{It}(E, 0, x) dx}{\int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) \mathbf{Rt}(E, 0, x) dx} \quad (17)$$

Якщо в останньому співвідношенні врахувати динамічні властивості іонної підсистеми, тобто залежність енергії кінцевого стану від частоти фонону, можна отримати наступне співвідношення для непружного розсіяння електрона на іонній гратці

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \text{Arctg} \frac{\int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S_{Dyn}^i(q(x), \omega) \sqrt{\frac{E+\omega}{E}} \mathbf{It}(E, \omega, x)}{\int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega S_{Dyn}^i(q(x), \omega) \sqrt{\frac{E+\omega}{E}} \mathbf{Rt}(E, \omega, x)} \quad (18)$$

Тут $S_{Dyn}^i(q(x), \omega)$ - динамічний структурний фактор іонної підсистеми металу; $q(x)$ - функція, що описує залежність модуля вектора розсіяння від косинуса кута розсіяння. Вона вводиться, як розв'язок наступного векторного рівняння: $\mathbf{q} = |\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i|$, тобто

$$q = \sqrt{4E + 2\omega - 4x\sqrt{E(E+\omega)}} \quad (19)$$

Враховуючи еквівалентність всіх фононних мод, динамічний структурний фактор неупорядкованого металу можна записати

$$\begin{aligned} S_{Dyn}^i(q, \omega) &= S^i(q) e^{-2W_q} \delta(\omega) + \\ &+ \frac{q^2}{2M} e^{-2W_q} \frac{\Theta(q - K_D)}{\omega} ([1 + n_\omega^{B-E}] \delta(\omega + \omega(q)) + n_\omega^{B-E} \delta(\omega - \omega(q))) + \\ &+ \frac{q^2 \Omega}{8\pi^2 M} \int_0^{K_D} dq' \frac{q'^2}{\omega} ([1 + n_\omega^{B-E}] \delta(\omega + \omega(q')) + n_\omega^{B-E} \delta(\omega - \omega(q'))) \times \\ &\times \int_{-1}^1 dy S^i(\sqrt{q^2 + q'^2 - 2qq'y}) \end{aligned} \quad (20)$$

Тут $S^i(q)$ - статичний структурний фактор іонної підсистеми металу; W_q - фактор Дебая-Валлера; K_D - хвильовий вектор Дебая; $\Theta(q - K_D)$ - функція Хевісайда; n_ω^{B-E} - розподіл Бозе-Енштейна; M - маса іона.

Далі варто розглядати окремо три різних доданки динамічного структурного фактора. Очевидно, що перший доданок незалежатиме від моделі опису фононного спектру, він відповідає внеску ізоенергетичного розсіяння. Підставляючи (20) в (18), отримаємо

$$\Delta(E) = \frac{1}{\pi} \text{Arctg} \frac{\int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) \mathbf{It}(E, 0, x) dx + Ph \mathbf{It}(E)}{\int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) \mathbf{Rt}(E, 0, x) dx + Ph \mathbf{Rt}(E)}, \quad (21)$$

де фононна поправка у чисельнику (21) визначається наступним чином:

$$\begin{aligned} Ph \mathbf{It}(E) &= \int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) [e^{-2W_{\sqrt{4E(1-x)}}} - 1] \mathbf{It}(E, 0, x) dx + \\ &+ \int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{q^2}{2M} e^{-2W_q} \frac{\Theta(q - K_D)}{\omega} \sqrt{\frac{E+\omega}{E}} \mathbf{It}(E, \omega, x) \times \\ &\times ([1 + n_\omega^{B-E}] \delta(\omega + \omega(q)) + n_\omega^{B-E} \delta(\omega - \omega(q)))|_{q=q_l(x)} + \\ &+ \int_{-1}^1 dx \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{q^2 \Omega}{8\pi^2 M} \sqrt{\frac{E+\omega}{E}} \mathbf{It}(E, \omega, x) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \int_0^{K_D} dq' \frac{q'^2}{\omega} ([1 + n_{\omega}^{B-E}] \delta(\omega + \omega(q')) + n_{\omega}^{B-E} \delta(\omega - \omega(q'))) \times \\ & \times \int_{-1}^1 dy S^i(\sqrt{q^2 + q'^2 - 2qq'y})|_{q=q_{II}(x)} \end{aligned} \quad (22)$$

Величина $Ph \mathbf{It}(E)$ визначається аналогічно до $Ph \mathbf{It}(E)$ заміною в співвідношенні (22) коефіцієнтів $\mathbf{It}(E, \omega, x)$ пропорційних до уявної частини матричних елементів квадрату одноузлової Т-матриці (15) на коефіцієнти пропорційні до дійсної $\mathbf{It}(E, \omega, x)$ (16). Залежності $q_I(x)$ та $q_{II}(x)$ визначаються згідно з (19).

Зрозуміло, що члени, які містять множник типу $\delta(\omega + \omega(q))$ описують процеси поглинання електроном фонону, а $\delta(\omega - \omega(q))$ – народження. З умови, що $E - \omega > 0$, яка з'являється внаслідок зайнятості усіх зв'язаних станів в іоні, впливає потреба у заміні множників типу народження фонону на $\Theta(E - \omega) \delta(\omega - \omega(q))$.

Модель Айнштайна

В рамках моделі Айнштайна $\omega(q) = \omega_0$ (ω_0 – частота Айнштайна). Враховуючи це, для фононої поправки з співвідношення (22) отримуємо

$$\begin{aligned} Ph \mathbf{It}(E) = & \int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) [exp(-2W_{\sqrt{4E(1-x)}}) - 1] \mathbf{It}(E, 0, x) dx + \\ & + \frac{1 + n_{\omega_0}^{B-E}}{\omega_0 M} \sqrt{1 + \frac{\omega_0}{E}} \int_{-1}^1 dx q^+(x)^2 \mathbf{It}(E, \omega_0, x) \times \\ & [exp(-2W_{q^+(x)}) + \frac{\Omega}{4\pi^2} \int_0^{K_D} dq' q'^2 \int_{-1}^1 dy S^i(\Delta Q(q^-(x), q', y))] + \\ & + \frac{\Theta(E - \omega_0) n_{\omega_0}^{B-E}}{\omega_0 M} \sqrt{1 - \frac{\omega_0}{E}} \int_{-1}^1 dx q^-(x)^2 \mathbf{It}(E, -\omega_0, x) \times \\ & \times [exp(-2W_{q^-(x)}) + \frac{\Omega}{4\pi^2} \int_0^{K_D} dq' q'^2 \int_{-1}^1 dy S^i(\Delta Q(q^-(x), q', y))] \end{aligned} \quad (23)$$

Тут

$$q^+(x) = \sqrt{4E + 2\omega_0 - 4x\sqrt{E(E + \omega_0)}} \quad (24)$$

$$q^-(x) = \sqrt{4E - 2\omega_0 - 4x\sqrt{E(E - \omega_0)}} \quad (25)$$

$$\Delta Q(q^{\pm}(x), q', y) = \sqrt{q^{\pm}(x)^2 + q'^2 - 2q^{\pm}(x)q'y} \quad (26)$$

Модель Дебая

В моделі Дебая $\omega(q) = c_s q$, де c_s – швидкість звуку в металі. Розгляд такої моделі є складнішим в порівнянні з моделлю Айнштайна, оскільки енергетичні поверхні розсіяння в другому доданку фононої поправки (23) не мають центральної симетрії. Це є очевидним з огляду на наступне. З (19) випливає, що у випадку поглинання фонону в другому доданку можна записати таке співвідношення для вектора розсіяння

$$q_I^+(x) = \sqrt{4E + 2c_s q_I^+(x) - 4x\sqrt{E(E + c_s q_I^+(x))}}, \quad (27)$$

а для випадку народження фонону

$$q_I^-(x) = \sqrt{4E - 2c_s q_I^-(x) - 4x\sqrt{E(E - c_s q_I^-(x))}}. \quad (28)$$

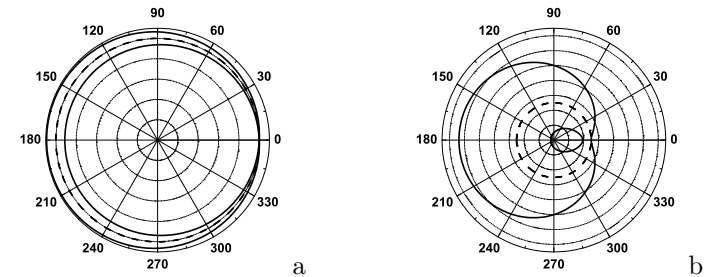


Рис. 1. Форма поверхні розсіяння (штрихова лінія – енергетична поверхня пружнього розсіяння, ззовні неї енергетична поверхня при поглинанні фонона, а всередині – при народженні фонона) (а – при великих E , б – поступове зменшення енергії)

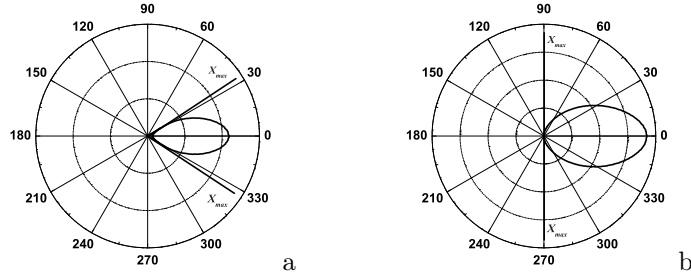


Рис. 2. Форма поверхні розсіяння у випадку народження фонона (а – поверхня не охоплює центр розсіяння; б – поверхня розсіяння проходить через центр розсіяння)

На графіках наведено енергетичні поверхні кінцевих станів, отримані з чисельних розв'язків рівнянь (27), (28).

З (рис.1) випливає, що при поступовому зменшенні енергії електрона (а саме наближенні її до енергії фонона) розділення між енергетичними поверхнями розсіяння у випадку народження і поглинання фонона зростає. При певному значенні енергії внутрішня поверхня перестає охоплювати центр розсіяння. Внаслідок такої поведінки $q_I^-(x)$ буде складатись з двох розв'язків $q_{I(1)}^-(x)$ (внутрішня частина кута $\angle(X_{max}, 0, X_{max})$ (рис.2а)) та $q_{I(2)}^-(x)$ (зовнішня частина кута $\angle(X_{max}, 0, X_{max})$ (рис.2а)), а межі інтегрування за косинусом кута розсіяння зміняться з інтервалу $[-1, 1]$ на $[X_{max}, 1]$ (див.рис.2а).

Умову такого переходу легко знайти, використавши для цього рис.2б. Як видно з рисунку, в момент цього переходу $X_{max} = 0$.

Отже, умова переходу запишеться

$$E = 2c_s^2 \quad (29)$$

Знаходження третього доданку в (23) є простішим. З (19) випливає, що у випадку поглинання фонона

$$q_{II}^+(x, q') = \sqrt{4E + 2c_s q' - 4x \sqrt{E(E + c_s q')}} \quad (30)$$

а для випадку народження фонона

$$q_{II}^-(x, q') = \sqrt{4E - 2c_s q' - 4x \sqrt{E(E - c_s q')}} \quad (31)$$

Знаючи поведінку енергетичних поверхонь кінцевих станів та використовуючи (27-31), отримуємо наступне співвідношення для фоновної поправки в рамках моделі Дебая

$$\begin{aligned}
Ph \mathbf{It}(E) &= \int_{-1}^1 S^i(\sqrt{4E(1-x)}) [exp(-2W\sqrt{4E(1-x)}) - 1] \mathbf{It}(E, 0, x) dx + \\
&+ \frac{1}{c_s M} \int_{-1}^1 dx \Theta(q_I^+(x) - K_D) [1 + n_{c_s q_I^+(x)}^{B-E}] q_I^+(x) exp(-2W_{q_I^+(x)}) \times \\
&\quad \times \sqrt{1 + \frac{c_s q_I^+(x)}{E}} \mathbf{It}(E, c_s q_I^+(x), x) + \\
&+ \frac{1}{c_s M} \int_{X_a}^1 dx \Theta(q_{I(1)}^-(x) - K_D) n_{c_s q_{I(1)}^-(x)}^{B-E} q_{I(1)}^-(x) exp(-2W_{q_{I(1)}^-(x)}) \times \\
&\quad \times \sqrt{1 - \frac{c_s q_{I(1)}^-(x)}{E}} \mathbf{It}(E, c_s q_{I(1)}^-(x), x) + \\
&+ \frac{\Theta(2c_s^2 - E)}{c_s M} \int_{X_a}^1 dx \Theta(q_{I(2)}^-(x) - K_D) n_{c_s q_{I(2)}^-(x)}^{B-E} q_{I(2)}^-(x) \times \\
&\quad \times exp(-2W_{q_{I(2)}^-(x)}) \sqrt{1 - \frac{c_s q_{I(2)}^-(x)}{E}} \mathbf{It}(E, c_s q_{I(2)}^-(x), x) + \\
&+ \frac{\Omega}{4\pi^2 c_s M} \int_0^{K_D} dq' [1 + n_{c_s q'}^{B-E}] q' \sqrt{1 + \frac{c_s q'}{E}} \int_{-1}^1 dx q_{II}^+(x, q') \times \\
&\quad \times \mathbf{It}(E, c_s q_{II}^+(x, q'), x) \int_{-1}^1 dy S^i(\Delta Q(q_{II}^+(x, q'), q', y)) + \\
&+ \frac{\Omega}{4\pi^2 c_s M} \int_0^{\min(K_D, E/c_s)} dq' n_{c_s q'}^{B-E} q' \sqrt{1 - \frac{c_s q'}{E}} \int_{-1}^1 dx q_{II}^-(x, q') \times
\end{aligned}$$

$$\times \mathbf{It}(E, c_s q_{II}^-(x, q'), x) \int_{-1}^1 dy S^i(\Delta Q(q_{II}^-(x, q'), q', y)) \quad (32)$$

Тут

$$X_a = \begin{cases} -1, & E > 2c_s^2 \\ 0, & E = 2c_s^2 \\ X_{max}, & E < 2c_s^2 \end{cases} \quad (33)$$

Величина X_{max} визначається з чисельного розв'язку рівняння (27) при $E < 2c_s^2$.

Висновки

Отже, нами отримано співвідношення, що дозволяють враховувати динамічні властивості іонної підсистеми у розрахунках густини станів електронів провідності в неупорядкованому металі. Фононні поправки є малими величинами, тому загальна картина поведінки густини станів буде відповідати випадку пружнього розсіяння окрім ділянок з енергією близько до нуля (порядку максимальної енергії фонону) та поблизу резонансних енергій в перехідних металах.

Література

1. Н. Мотт, Электроны в неупорядоченных структурах – Москва, Мир, 1969, с. 386
2. Lloyd P., Smith P. V. – Adv.Phys., 1972, v. 21, p. 69
3. Л. И. Ястребов, А. А. Кацнельсон, Основы одноэлектронной теории твёрдого тела – Москва, Наука, 1984, с. 484
4. Сунакава С. Квантовая теория рассеяния – Москва, Мир, 1979, с.275

Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Петро Миколайович Якібчук
Олег Володимирович Волков

ЕЛЕКТРОННА СТРУКТУРА НЕВПОРЯДКОВАНИХ МЕТАЛІВ З
ВРАХУВАННЯМ ДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ІОННОЇ ПІДСИСТЕМИ

Роботу отримано 13 травня 2005 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку семінаром відділу теорії металів та сплавів

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені