

M. Scheffler, S. Boeck, J. Neugebauer. Exact-exchange calculations of the electronic structure of AlN, GaN and InN. // Computer Physics Communications. 2005. V. 169.– P. 28–31. 4. Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E., and Sobchuk I.S. // Phys.Stat.Sol.B. – 1997. – Vol.200. – P.129–136. 5. Syrotyuk S.V., Kraevsky S.N., Kynash. Yu.E. // Ukrainian Journal of Physics, 2006. V. 51, N. 7, P. 675 – 679. 6. Huzinaga S., Klobukowski M. // J.Mol.Structures. 1988. 167. P.1–210. 7. Юхновский И.П., Гурский З.А. Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем. – К.: Наук. думка, 1991. – 228 с. 8. H. Taketa, S.Huzinaga, and K.O-ohata // J.Phys.Soc.Japan. 1966. 21. P. 2313–2324. 9. E.E. Lafon // J.Comput. Phys. 1989. 83. P. 185. 10. Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E. // Phys.Stat.Sol.B. – 1996. – 196. – P.95–101. 11. Perdew J.P., Zunger A. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. – P. 5048–5079. 12. Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T. Numerical Recipes.-Cambridge.: Cambridge University Press, 1989.

УДК 537.311.33

К.К. Товстюк, Н.І. Кузик

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра напівпровідникової електроніки

ВПЛИВ АКУСТИЧНИХ ФОНОНІВ НА ЕЛЕКТРОННИЙ ГАЗ У СИЛЬНО АНІЗОТРОПНИХ ТА ІЗОТРОПНИХ КРИСТАЛАХ

© Товстюк К.К., Кузик Н.І., 2007

C.C. Tovstyuk, N.I. Kuzyk,

ACCOUSTICAL PHONONS INFLUENCE ON ELECTRON GAS IN STRONGLY ANISOTROPIC AND ISOTROPIC SYSTEMS

© Tovstyuk C.C., Kuzyk N.I., 2007

Обчислено дійсну та уявну частини масового оператора (МО) для електронів в ізотропних кристалах з параболічним законом дисперсії та для електронів у сильно анізотропних кристалах із Фівазовим законом дисперсії, які взаємодіють із акустичним фононом з лінійною дисперсією. Обчислення проводяться для параметрів шаруватого кристала InSe. Порівнюючи такі величини, можна зробити висновок про особливості електрон-фононної взаємодії у кристалах зі слабким зв'язком, зокрема з проведених обчислень випливає висновок про істотніший вплив акустичних фононів на розмиття енергетичних рівнів порівняно зі зміною ефективних мас електронів для обох розглянутих дисперсій.

We evaluated real and imagine parts of Mass operator (MO) for isotropic crystals with parabolic electron energy and for anisotropic crystals with electron energy subscribed by Fivas dispersion. These electrons interact acoustical phonons with linear energy dependence on momentum. All investigation are carried out with InSe parameters. Comparing MO we come to conclusion about the peculiarity of electron phonon interaction in crystals with weak binding. From our investigations we see that acoustical phonons influence the energy level degradation is much more sufficient as its change of electron affective mass for both considered dispersions.

1. Вступ

Електрон-фононна взаємодія у шаруватих кристалах (ШК) – кристалах зі слабким зв'язком – розглядалася неодноразово, зокрема у роботах [1, 2], в яких досліджувалися впливи змін параметрів електронного спектра (які можуть бути реалізовані, наприклад, за допомогою інтеркаляції ШК чи дією на ШК всебічного чи одноосьового стиску[1]) на результати такої взаємодії, а також впливу

параметрів фононного спектра (згинних коливань [2]) на таку взаємодію. У роботі вперше обчислено МО для двох різних моделей із можливим збігом параметрів зроблено висновок про:

а) істотний вплив МО для першого наближення теорії збурення на розмиття рівнів (час життя електронів) для обох розглянутих моделей і не істотну зміну ефективних мас електронів двох дисперсій внаслідок такої взаємодії;

б) менш істотний вплив такої взаємодії у кристалах зі слабким зв'язком.

2. Постановка задачі та використані наближення

У роботі розраховано масовий оператор електрон-фононної взаємодії, який, як відомо [3,4], у першому наближенні теорії збурення, має вигляд

$$\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega) = ig^2 \int \frac{d^4 k_i}{(2\pi)^4} D^o(\vec{k} - \vec{k}_i) G_k^o(\omega_i) . \quad (2.1)$$

У (2.1) g – постійна електрон-фононної взаємодії, $G_k^o(\omega_1)$ та $D^o(\vec{k} - \vec{k}_i)$ функції Гріна ідеального газу електронів та фононів:

$$G_k^o(\omega) = \frac{1}{\omega - E(\vec{k}) + \mu + i\delta \text{sign}(E(\vec{k}) - \mu)} , \quad (2.2)$$

$$D_q^o(\omega) = \frac{\omega_o(\vec{q})}{2} \left\{ \frac{1}{\omega - \omega_o(\vec{q}) + i\delta} - \frac{1}{\omega + \omega_o(\vec{q}) - i\delta} \right\} . \quad (2.3)$$

У (2.2) та (2.3) $E(\vec{k})$, $\omega_o(\vec{q})$ – закон дисперсії електрона та фонона, відповідно, μ – хімпотенціал електронів, ω – енергія частинок.

Фізичний зміст $\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ – зміна енергії ідеального газу електронів внаслідок електрон-фононної взаємодії. Дійсна частина (3.1) може містити доданок, який не залежить від квазіімпульса і визначає зсув енергії дна зони провідності; та доданок, який залежить від квазіімпульсу і визначає зміну ефективної маси електронів, обумовлену електрон-фононною взаємодією.

Уявна частина $\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ визначає розмиття рівня – півширину піка поглинання, або, згідно із співвідношенням невизначеностей Гейзенберга, зміну часу життя електрона в зоні, обумовлену електрон-фононною взаємодією.

Під час розрахунку (2.1) ми зіставляємо результати для кристалів із різними хімічними зв'язками: слабоанізотропних та сильноанізотропних. При цьому для слабоанізотропних кристалів дисперсія енергії електронів у зоні Бріллюена має параболічний характер

$$E(k_1) = \alpha_1(k_x^2 + k_y^2) + \alpha_2 k_z^2 , \quad (2.4)$$

а для сильноанізотропних кристалів, таких як, наприклад, шаруваті, дисперсія є непараболічною у напрямку Ван-дер-Ваальсового зв'язку

$$E(k_1) = \alpha_1(k_x^2 + k_y^2) + \beta(1 - \cos(k_z d)) . \quad (2.5)$$

Обчислення проводилися для електронів зони провідності $E(\vec{k}) > \mu$, які взаємодіють із акустичними фононами:

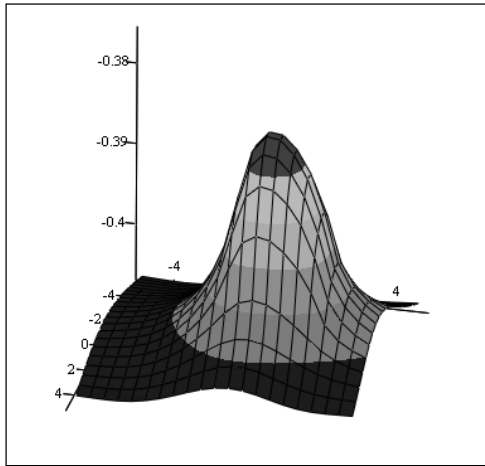
$$\omega(\vec{q}) = U \cdot q \quad (2.6)$$

де U – пружна стала, пов'язана із швидкістю звуку у кристалі. Як вихідні параметри ми враховували значення ефективних мас, ширини зони провідності та Дебасву частоту для InSe, наведені у [5].

3. Вплив взаємодії електронів із акустичними фононами на час життя електронів в зоні провідності

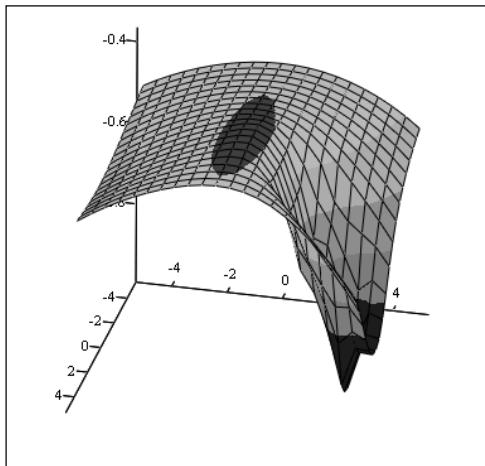
Результати обчислення уявної частини масового оператора (2.1) для сильноанізотропного кристала з дисперсією (2.5) наведено на рис. 1, де показано значення уявної частини $\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ як

функції квазіімпульсів (k_x, k_z) . На рис. 2 наведено аналогічну поверхню для ізотропного кристала із дисперсією (2.4)



vvi

Рис. 1. Поверхня $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ залежно від квазіімпульсів (k_x, k_z) , обчислена для енергії взаємодії, що відповідає дну зони провідності шаруватого кристала



vvi

Рис. 2. Поверхня $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ залежно від квазіімпульсів (k_x, k_z) , обчислена для енергії взаємодії, що відповідає дну зони провідності ізотропного кристала

Зазначимо, що аналогічні обчислення для інших значень енергії взаємодії приводили до поверхонь, аналогічних поданим на рис. 1, 2 із мало помітною залежністю від чисельного значення енергії взаємодії. Проведені нами обчислення $\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ для площини (k_x, k_y) показали, що, незважаючи на істотну анізотропію у законі дисперсії (2.5), поверхні $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ є симетричними як у площинах (k_x, k_y) , так і у площинах (k_x, k_z) для обох моделей електронного спектра.

Порівнюючи рис. 1 з рис. 2, бачимо, що для обох випадків спостерігаються поверхні 2-го порядку із чітко вираженим максимумом.

Поверхні мають мінімуми в центрі і на краях зони Бріллюена і максимум на діагоналі. Однак для ізотропного кристала електрон-фононна взаємодія відчутна вздовж всієї зони Бріллюена, тоді як у шаруватому кристалі – лише в околі максимуму. Зазначимо також значно менш істотну залежність від квазіімпульсу у поверхонь $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ в ізотропних кристалах.

Можна пояснити наявність різних типів поверхонь для ізотропних та сильноанізотропних кристалів відмінністю пружного зв'язку у таких кристалах. Якщо у кристалів з параболічною дисперсією однаковими за порядком величини є пружні сталі у всіх напрямках і збудження амортизується тривимірною ґраткою, то сильноанізотропні кристали є близькі до двовимірних, і взаємодія із фононом внаслідок слабкого зв'язку має більш виражений резонансний характер.

4. Вплив електрон-фононної взаємодії на ефективні маси електронів у сильноанізотропних кристалах

Результати обчислення дійсної частини масового оператора для кристалів із параболічною дисперсією (2.4) та сильноанізотропних кристалів із дисперсією (2.5) для напрямків (k_x, k_z) наведено на рис. 3 та рис. 4 відповідно.

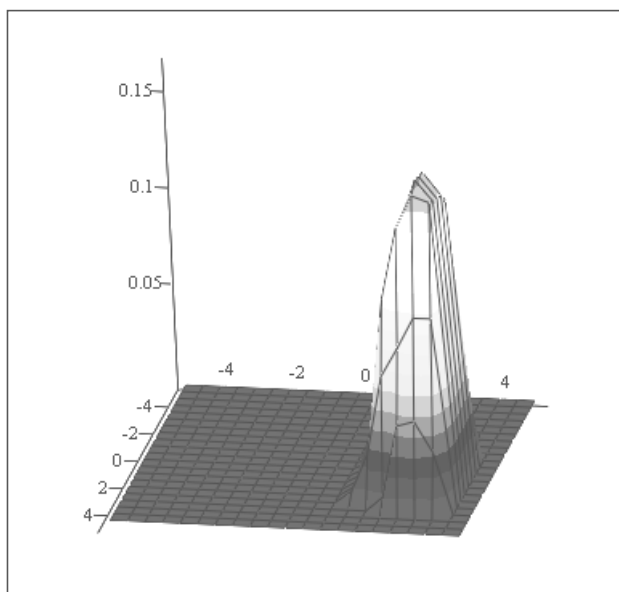


Рис. 3. Поверхня $\text{Re}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ залежно від квазіімпульсів (k_x, k_z) , обчислена для енергії взаємодії, що відповідає дну зони провідності ізотропного кристала

Як і для поверхонь уявної частини МО, спостерігається аналогічна залежність поверхонь $\text{Re}\Sigma_1(\vec{k}, \omega)$ і у площинах (k_x, k_y) .

Аналізуючи дані дійсної частини МО для різних моделей електронного спектра, наведені на рис. 3 та рис. 4, бачимо, що для обох випадків $\text{Re}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ значно менша за своїми числовими значеннями ніж уявна частина МО, що свідчить про незначний вплив взаємодії електронів із акустичними фононами у цій області на ефективні маси електронів.

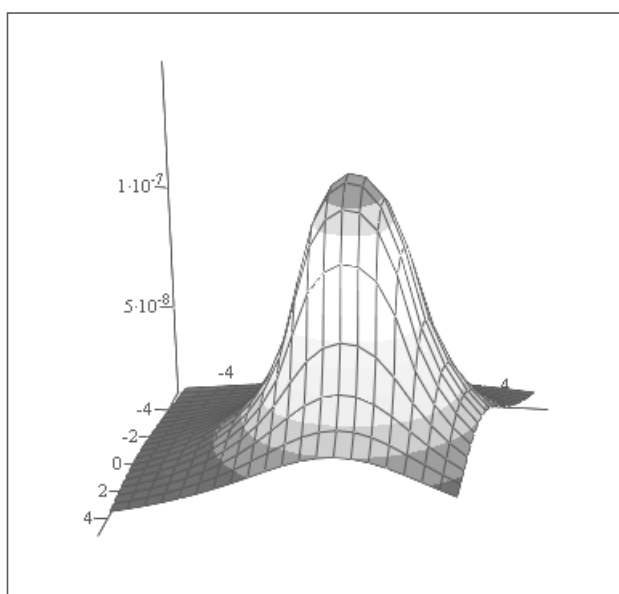


Рис. 4. Поверхня $\text{Re}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ залежно від квазіімпульсів (k_x, k_z) , обчислена для енергії взаємодії, що відповідає дну зони провідності шаруватого кристала

Отримані числові значення вказують на істотніший вплив електрон-фононої взаємодії на електронний спектр у кристалі, що описується параболічною моделлю.

5. Аналіз отриманих результатів та висновки

Підсумовуючи отримані результати, доходимо висновку, що:

1. Уявна частина $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ для шаруватого кристала має вигляд резонансного піка поглинання, симетричного відносно різних координат квазіімпульсу. Хоча дисперсія енергії електронів має несиметричний вигляд, ця відмінність нівелюється внаслідок взаємодії із акустичними фононами.

Абсолютна величина $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ залежить від квазіімпульса взаємодії. Зазначимо, що ця залежність є суттєвішою, ніж залежність від енергії взаємодії.

2. У параболічних кристалах $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ менш істотно залежить від квазіімпульса електрона.

3. Порівнюючи поверхні рис. 1 та рис. 2, бачимо, що електрон-фононна взаємодія змінює $\text{Im}\Sigma^{(1)}(\vec{k}, \omega)$ у ізотропних кристалах вздовж усієї зони Бріллюена, тоді як у ШК – лише в певній області.

4. Дійсна частина масового оператора для обох моделей електронного спектра має дуже незначні зміни залежно від квазіімпульсу – не більші ніж $1.2 \cdot 10^{-7}$ еВ для ШК та 0,12 еВ для ізотропного кристала в околі максимуму. Ця величина практично не змінюється із зростанням енергії взаємодії.

5. Порівнюючи дані числових розрахунків, можемо зробити висновок про значно менший вплив електрон-фононої взаємодії у сильноанізотропних кристалах порівняно із ізотропними кристалами, що узгоджується із висновками, зробленими у [6, 7].

1. Lukianets V.A., Tovstyuk C.C. *Phys. Stat. Sol. (b)* 1985, v. 132, K81–K85. 2. Бурий О.А., Товстюк К.К. // *Укр. фізичний журнал.* – 1996. – N 5-6 – С.565–569. 3. Абрикосов А.А., Горьков А.П., Дзялошинский И.Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике.* – М., 1968. 4. Aulbur, L. Jönsson and J.W. Wilkins // *Solid State Physic.* – 2000. – 54. – P.1–120. 5. Медведева З.С. *Халькогениды элементов III б подгруппы периодической системы.* – М. 1968. 6. Tovstyuk K.D., Tovstyuk C.C. *Julien et al. New Trends in Intercalation Compounds for Energy Storage.* – 2002. – P.629–532. 7. Товстюк К.К. // *Вісник Нац. ун-ту “Львівська політехніка”.* – 2002. – №459. – С.165 – 178.