

ОПТИЧЕСКОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

М.А. ИШАНЯН

Приближение когерентного потенциала применяется для расчета внутризонного оптического поглощения в неупорядоченных бинарных сплавах металлов при температурах выше температуры Дебая. Исследуются пределы слабого и сильного „примесного“ рассеяния.

Оптические методы исследования являются важным источником информации об электронной структуре неупорядоченных сплавов. Интерпретация экспериментальных данных, их связь с параметрами электронной структуры затрудняются отсутствием в настоящее время разработанной теории оптических свойств неупорядоченных сплавов. Известна работа [1], посвященная исследованию оптических свойств бинарных неупорядоченных сплавов при нулевой температуре. В приближении когерентного потенциала (ПКП) было показано, что внутризонное оптическое поглощение в случае слабого „примесного“ рассеяния описывается формулой типа Друде. Однако в широком классе сплавов, в частности, в сплавах переходных металлов с незаполненной $3d$ -полосой оптическое поглощение в инфракрасной области спектра определяется d -подобными электронами проводимости, а для них рассеяние на примесях не является слабым [2]. Оптическое поглощение в неупорядоченных сплавах при одновременном рассеянии электронов проводимости как на „примесях“, так и на тепловых колебаниях решетки сплава ранее не рассматривалось.

Постановка задачи

Гамильтониан, описывающий зону бинарного неупорядоченного сплава A_xB_y ($y = 1 - x$) в гармоническом приближении по электрон-фононному взаимодействию, можно записать в виде

$$H = \sum_{n,m} t_{nm} a_n^+ a_m + \sum_n \epsilon^n a_n^+ a_n + \sum_n \vartheta^n a_n^+ a_n; \quad (1)$$

$$t_{nm} = N^{-1} \sum_k \Delta(\mathbf{k}) \exp \{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m)\} \quad (2)$$

есть матричный элемент интеграла перескока в ванье-представлении, не зависящий от состава сплава и определяемый лишь законом дисперсии $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta \cdot s(\mathbf{k})$, $-1 \leq s(\mathbf{k}) \leq 1$, Δ — полуширина зоны проводимости, принимаемая равной единице. Величина ϵ^n принимает значения ϵ^A или ϵ^B в зависимости от того, какой атом, A или B , находится в n -ом узле решетки. Разность $|\epsilon^B - \epsilon^A| = \delta\epsilon$ определяет величину потенциала рассеяния. Кванты тепловых колебаний решетки

сплава по аналогии с квантами колебаний идеальной решетки назовем фононами. Электрон-фоонное взаимодействие описывается членом

$$\vartheta^n = \sum_q (\gamma_q^n b_q + \gamma_q^{n*} b_q^\dagger), \quad (3)$$

где γ_q^n — матричный элемент электрон-фоонного взаимодействия в одноузельном приближении. Как и t_{nm} , параметры γ_q^n , b_q и ϑ^n , по предположению, не зависят от состава сплава.

Исходя из формулы Кубо, применяя метод расщепления двухтокового коррелятора в ПКП [3] и предполагая применимость принципа Борна-Опенгеймера [4] к электрон-фоонной системе, реальную часть тензора электропроводности $\sigma_{xx}(\omega)$, определяющую оптическое поглощение, можно записать в следующем виде:

$$\sigma'(\omega) \equiv \text{Re } \sigma_{xx}(\omega) = \frac{e^2}{2\pi} \int d\eta \left(\frac{\partial f}{\partial \eta} \right) \left\{ \frac{\Phi[\eta^+ + \omega - \Sigma(\eta^+ + \omega)] - \Phi[\eta^- - \Sigma(\eta^-)]}{\omega + \Sigma(\eta^+ + \omega) - \Sigma(\eta^-)} - \frac{\Phi[\eta^- + \omega - \Sigma(\eta^- + \omega)] - \Phi[\eta^- - \Sigma(\eta^-)]}{\omega + \Sigma(\eta^- + \omega) - \Sigma(\eta^-)} \right\}, \quad (4)$$

где e — заряд электрона, $f(\eta)$ — функция распределения Ферми, $\eta^\pm = \eta \pm i0$. Величина $\Phi(z)$ есть функция комплексного аргумента

$$\Phi(z) = \int d\xi (z - \xi)^{-1} \frac{1}{3N} \sum_{\mathbf{k}} v^2(\mathbf{k}) \delta[\xi - \Delta(\mathbf{k})]. \quad (5)$$

Собственно-энергетическая часть сплава $\Sigma(z)$ определяется решением самосогласованного уравнения

$$\ll \frac{\xi^n + \vartheta^n - \Sigma(z)}{1 - [\xi^n + \vartheta^n - \Sigma(z)] F(z)} \gg_\phi = 0, \quad (6)$$

где знак $\langle \rangle$ означает конфигурационное усреднение в ПКП, а $\langle \rangle_\phi$ — усреднение по положениям колеблющихся ионов,

$$F(z) = F_0[z - \Sigma(z)] = \int d\eta (z - \eta)^{-1} \rho(\eta), \quad (7)$$

$\rho(\eta)$ — плотность состояний, приходящихся на атом сплава.

При произвольных величинах потенциалов „примесного“ и электрон-фоонного рассеяния и произвольном законе дисперсии уравнение (6), а следовательно и $\sigma_{xx}(\omega)$, можно решить лишь численно. Для выяснения качественных закономерностей в концентрационной и температурной зависимостях $\sigma'(\omega)$ примем следующую модель сплава:

а) плотность состояний сплава с законом дисперсии $\Delta(\mathbf{k})$ описывается кривой полуэллиптической формы

$$\rho_0(\eta) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} [1 - \eta^2]^{1/2}, & |\eta| \leq 1 \\ 0, & |\eta| > 1; \end{cases} \quad (8)$$

при этом функция Грина, соответствующая данной плотности состояний, согласно уравнению (7), имеет вид

$$F_0[z - \Sigma(z)] = 2[z - \Sigma(z)] - 2|[z - \Sigma(z)]^2 - 1]^{1/2}; \quad (9)$$

б) при данном законе дисперсии $\Delta(k)$

$$N^{-1} \sum_k v^2(k) \delta[\xi - \Delta(k)] = v_m^2 (1 - \xi^2)^{3/2}, \quad (10)$$

где v_m имеет смысл максимальной скорости электрона в зоне.

Подобная модель сплава была успешно применена при расчете статической электропроводности [3] и исследовании аномального эффекта Холла в сплавах [2].

При усреднении по положениям колеблющихся ионов будем следовать методу, предложенному в работе [4], где показано, что

$$\langle \Psi(\xi^n) \rangle_\phi = \int d\xi P^n(\xi) \Psi(\xi), \quad (11)$$

где

$$P^n(\xi) = (2\pi\alpha^n)^{-1/2} e^{-\xi^2/2\alpha^n}.$$

Неизученность фононных спектров сплавов ограничивает наше исследование областью высоких температур $T > \bar{T}_D$ ($\bar{T}_D = xT_D^A + yT_D^B$), где α^n заведомо пропорционально T :

$$\alpha^n = g^n \frac{T}{\bar{T}_D} \quad (T > \bar{T}_D); \quad (12)$$

константы g^A и g^B характеризуют величину электрон-фононного взаимодействия в чистых металлах A и B .

Предполагается слабость электрон-фононного взаимодействия, $\frac{\alpha}{\Delta^2} \ll 1$, что подтверждается оценками работы [4]. Следовательно, справедливо разложение в ряд

$$\begin{aligned} \Sigma(z) &= \Sigma^0(z) + \Sigma^1(z) + O(\alpha^2), \\ F(z) &= F^0(z) + F^1(z) + O(\alpha^2), \end{aligned} \quad (13)$$

где индекс 0 означает, что соответствующие величины вычисляются при $T=0$. Собственно-энергетическая часть сплава в отсутствие электрон-фононного взаимодействия, $\Sigma^0(z)$, определяется самосогласованным уравнением ПКП

$$\left\langle \frac{\xi^n - \Sigma^0(z)}{1 - [\xi^n - \Sigma^0(z)] F^0(z)} \right\rangle = 0. \quad (14)$$

С учетом (13) и (14) самосогласованное уравнение для нахождения $\Sigma^1(z)$ примет вид

$$\begin{aligned} -\Sigma^1(z) &< [1 - [\xi^n - \Sigma^0(z)] F^0(z)]^{-2} > + \\ &+ \ll (\xi^n)^2 F^0(z) [1 - [\xi^n - \Sigma^0(z)] F^0(z)]^{-3} >_\phi + \\ &+ F^1(z) < [\xi^n - \Sigma^0(z)] [1 - [\xi^n - \Sigma^0(z)] F^0(z)]^{-2} > = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Согласно методу ПКП, функция $F_0[z - \sum(z)]$ связана с функцией Грина $F^0(z)$ при $T = 0$ и полной функцией Грина сплава $F(z)$ следующим образом:

$$F_0[z - \sum^0(z)] = F^0(z), \quad (16)$$

$$F_0[z - \sum(z)] = F(z).$$

Тогда уравнение (9) можно переписать так

$$\sum(z) = z - \frac{1}{F(z)} - \frac{1}{4} (F(z), \quad (17)$$

откуда, используя (13), получаем

$$F^2(z) = \sum^2(z) \frac{4[F^0(z)]^2}{4 - [F^0(z)]^2}. \quad (18)$$

Внутризонное оптическое поглощение в инфракрасной области спектра

Указанные в предыдущей части модельные предположения используются здесь для расчета тензора электропроводности в инфракрасной области спектра ($\omega < \Delta$) при слабом и сильном „примесном“ рассеянии. При вычислениях мы ограничиваемся первым не исчезающим приближением по малым параметрам $\frac{\omega}{\Delta}$, $\frac{\alpha}{\Delta^2} \ll 1$, а также пренебрегаем температурным размытием функции Ферми, т. е. считаем, что $-\frac{\partial f}{\partial \eta} = \delta(\eta - \mu)$, μ — уровень Ферми сплава.

1. Слабое „примесное“ рассеяние

Слабое „примесное“ рассеяние характеризуется параметром $\delta = \frac{|\epsilon^B - \epsilon^A|}{\Delta} \ll 1$. При этом из уравнений (14) и (15) с точностью до членов порядка δ^2 следует

$$\sum^0(z) = \bar{\epsilon} + xy \delta^2 F_0(z - \bar{\epsilon}), \quad (19)$$

$$\sum(z) = \bar{\epsilon} + (xy \delta^2 + \bar{\alpha}) F_0(z - \bar{\epsilon}), \quad (20)$$

где

$$\bar{\epsilon} = x\epsilon^A + y\epsilon^B, \quad (21)$$

$$\bar{\alpha} = x\alpha^A + y\alpha^B = (xg^A + yg^B) \frac{T}{T_D}.$$

Тогда из уравнения (4) получаем

$$\sigma'(\omega) = \frac{e^2 v_m^2}{8} [\pi \rho^0(\mu)]^2 \frac{\Gamma_{ал}}{\omega^2 + \Gamma_{сл}^2} = \sigma(0) \frac{\Gamma_{сл}^2}{\omega^2 + \Gamma_{сл}^2}, \quad (22)$$

где

$$\Gamma_{cl} \approx 2\pi\rho^0(\mu)(xy\delta^2 + \bar{z}), \quad (23)$$

$$\pi\rho^0(\mu) = 2[1 - (\mu - \bar{\epsilon})^2]^{1/2}. \quad (24)$$

Γ_{cl} есть частота релаксации электронов проводимости в сплаве, аддитивная для „примесного“ и электрон-фононного механизмов рассеяния, т. е. удовлетворяет правилу Маттиссена. Из уравнения (22) можем заключить, что оптическое поглощение в случае слабого „примесного“ и электрон-фононного рассеяний описывается формулой типа Друде.

2. Сильное „примесное“ рассеяние

В пределе сильного „примесного“ рассеяния, когда $\delta \gg 1$, исходная плотность состояний сплава расщепляется на два изолированных участка — в окрестности ϵ^A и в окрестности ϵ^B . Рассмотрим случай, когда μ лежит в окрестности ϵ^A (получаемые результаты применимы к случаю μ в окрестности ϵ^B при одновременной замене ϵ^A на ϵ^B и x на y).

С точностью до членов порядка δ^{-1} имеем [2]

$$\Sigma^0(z) = \epsilon^A - y[F^0(z)]^{-1},$$

где

$$F^0(z) = 2(z - \epsilon^A) + i\pi\rho^0(z), \quad (25)$$

$$\pi\rho^0(z) = 2[x - (z - \epsilon^A)^2]^{1/2}.$$

Тогда из уравнений (15) и (18) следует

$$\Sigma^a(z) = \frac{\alpha^A}{x} F^0(z) \frac{4 - [F^0(z)]^2}{4x - [F^0(z)]^2}, \quad (26)$$

$$F^a(z) = \frac{\alpha^A}{x} F^0(z) \frac{4[F^0(z)]^2}{4x - [F^0(z)]^2}. \quad (27)$$

Плотность состояний сплава $\pi\rho(\eta) = \text{Im} F(\eta^-)$ в этом случае имеет вид

$$\pi\rho(\eta) = \pi\rho^0(\eta) - \pi\rho^0(\eta) \frac{2\alpha^A}{x} \left[1 - \frac{(\eta - \epsilon^A)^2}{x - (\eta - \epsilon^A)^2} \right], \quad (28)$$

свидетельствующий о том, что повышение температуры приводит к размыванию плотности состояний сплава.

Подставляя (25) — (28) в выражение (4), после ряда выкладок для $\sigma'(\omega)$ в рассматриваемом случае получаем

$$\sigma'(\omega) = \sigma(0) \left[1 - K(x, y) \frac{\omega^2}{\omega^2 + \Gamma^2} \right], \quad (29)$$

где $\sigma(0)$ — статическая электропроводность при сильном рассеянии,

$$\sigma(0) = \frac{e^2 v_m^2}{6} [\pi\rho(\mu)]^2 \left(3 + \frac{x}{y} \right),$$

$$K(x, y) = 3 \frac{xy}{1+x} \frac{[\pi\rho(\mu)]^2 - 1 - x}{[\pi\rho(\mu)]^2 (x + 1,5y)} + x \frac{[\pi\rho(\mu)]^2 + 3y}{[\pi\rho(\mu)]^2 (x + 1,5y)}, \quad (30)$$

$\pi\rho(\mu)$ определяется формулой (28),

$$\Gamma = \frac{y}{1+x} \pi\rho^0(\mu) + \frac{4\alpha^A}{1+x} \pi\rho^0(\mu) + \frac{4\alpha^A y}{1+x} \pi\rho^0(\mu) \left\{ \frac{2}{[\pi\rho^0(\mu)]^2} + \frac{1}{1+x} \right\}. \quad (31)$$

Выражение (29) указывает на существенное отклонение характера оптического поглощения от закона Друде в области средних концентраций. В пределе малых концентраций одной из компонент сплава ($y \rightarrow 0$) уравнение (29) переходит в формулу типа Друде. Заметим, что подобное поведение величины $\sigma'(\omega)$ было выявлено при измерении внутризонного оптического поглощения в сплавах, к которым более всего применим предел сильного рассеяния [5].

Величина Γ представляет собой эффективную перенормированную частоту релаксации электронов проводимости сплава, определяемую соотношением

$$\Gamma = \left[\frac{2 |\operatorname{Im} \sum (\eta^-)|}{1 - \frac{d}{d\eta} \operatorname{Re} \sum (\eta^-)} \right]_{\eta=\mu}, \quad (32)$$

где

$$\operatorname{Re} \sum (\eta^-) = \epsilon^A - \frac{y}{2x} (\eta - \epsilon^A) + 2\alpha^A \frac{\eta - \epsilon^A}{x} \quad (33)$$

определяет перенормировку энергетического спектра механизмами „примесного“ и электрон-фононного взаимодействия, а

$$\operatorname{Im} \sum (\eta^-) = \frac{y}{4x} \pi\rho^0(\eta) + \frac{\alpha^A}{x} \pi\rho^0(\eta) \left\{ 1 + \frac{2y}{[\pi\rho^0(\eta)]^2} \right\} \quad (34)$$

характеризует затухание.

Как видно из (31) и (33), при определенных концентрациях и температуре вклад электрон-фононного механизма рассеяния может достичь величины вклада „примесного“ рассеяния в эффективную частоту релаксации электронов проводимости в сплаве. В отличие от случая слабого рассеяния сильное „примесное“ рассеяние характеризуется нарушением правила Нордхейма („примесное“ рассеяние уже не пропорционально xu) и правила Маттиссена (третье слагаемое в (31)). В этом смысле третий член в (31) можно считать интерференционным.

Таким образом, можно заключить, что формула типа Друде, используемая в настоящее время для интерпретации экспериментальных данных, справедлива лишь для случая слабого „примесного“ рассеяния, $\delta \ll 1$, что, по-видимому, выполняется для s-подобных электронов проводимости. В сплавах же, где в кинетические явления вносят вклад электроны проводимости узких зон, инфракрасное поглощение описывается полученным выражением (29). Представляется интересным экспериментальная проверка данного вывода.

В заключение выражаю благодарность проф. Е. И. Кондорскому за предложенную тему и интерес к работе, а также А. Б. Грановскому за ценные замечания при обсуждении работы.

МГУ имени М. В. Ломоносова

Поступила 30.IX.1975

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. B. Velicky, K. Levtn. Phys. Rev., B2, 938 (1970).
2. Е. И. Кондорский, А. В. Ведряев, А. Б. Грановский. ФММ, 40, 903 (1975).
3. B. Velicky. Phys. Rev., 184, 614 (1969).
4. A. Chen. G. Welsz, A. Sher. Phys. Rev., B5, 239 (1972).
5. C. J. Flaten, E. A. Stern. Phys. Rev., B11, 638 (1975).

ՕՊՏԻԿԱԿԱՆ ԿԼԱՆՈՒՄԸ ԶԿԱՐԳԱՎՈՐՎԱԾ ՀԱՄԱԶՈՒԼՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ
ԲԱՐՁՐ ԶԵՐՄԱՍՏԻՃԱՆՆԵՐԻ ԴԵՊՓՈՒՄ

Մ. Ա. ՆՇԱՆՅԱՆ

Կոհերենտ պոտենցիալի մոտավորությունը կիրառվում է մետաղների շկարզավորված բինարային համաձուլվածքներում զոնային օպտիկական կլանման հաշվարկի համար, Դեբայի չեղմաստիճանից բարձր չեղմաստիճանների դեպքում: Հետազոտվում են թույլ և ուժեղ «խառնուրդային» ցրման սահմանները:

OPTICAL ABSORPTION IN DISORDERED ALLOYS AT HIGH TEMPERATURES

M. A. NSHANYAN

The coherent-potential approximation is used for the calculation of intraband optical absorption in disordered binary alloys of metals at temperatures higher than the Debye temperature. The limits of weak and strong "impurity" scattering are considered.