

УДК 539.2

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ В ПРИБЛИЖЕНИИ ЯЧЕИСТЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ И РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ЯДРАХ В КРИСТАЛЛАХГ.В. ГРУШЕВСКАЯ¹, Л.И. ГУРСКИЙ²¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 10 июня 2005

В рамках метода ячеистых потенциалов с использованием диаграммной техники Фейнмана было рассмотрено рассеяние на атомных областях и ядрах кристалла. Показано, что вклад в поляризацию каждой отдельной энергетической зоны кристалла может быть описан как рассеяние на поле тяжелой частицы, и найден поляризационный оператор.

Ключевые слова: поляризация, кристалл, ячеистый потенциал, рассеяние.

Введение

В [1] в рамках метода ячеистых потенциалов было предложено использовать в расчетах энергетических зон наноструктурированных кристаллов в качестве атомных рассеивающих областей маффин-тин (МТ) эллипсоиды. Так как кулоновское поле релятивистского электрона сжато в направлении движения к ядру атома, в системе отсчета электрона кулоновское поле ядра также теряет сферическую симметрию. Возникающий при этом ток тяжелой частицы, которой является ядро, приводит к процессу Вайцекера–Вильямса, поляризующему окружение электрона [2]. В связи с этим важно соотносить этот релятивистский поляризационный эффект с релятивистским рассеянием на токе МТ-эллипсоида. Целью данной работы является оценка величины вайцекеровской поляризации в кристаллах.

Релятивистская поляризация в поле МТ-эллипсоида

Сначала обратимся к ранее полученным результатам. В [1] в рамках метода проекционных операторов получено выражение для поляризационного оператора $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)}(q, z)$ в приближении случайных фаз:

$$\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)}(q, z) = \Pi_{n;\nu\mu}^{(k)free}(q, z) + \Pi_{n;\nu\mu}^{(k)loc}(q, z) = \frac{e^2}{V_{BZ}} \left\{ \delta_{\nu\mu} I_{nn} + \text{Tr} C \sum_{n' \neq n} \frac{4r_0 e_c}{3\epsilon_0} \cos^2 \theta_{qd} \right. \\ \left. \left(i \left| \vec{d}_{n',n}^{(k)} \right| I \delta_{\nu 0} - \left| \vec{B}_{n',n}^{(k)} \right| \sigma_\nu (1 - \delta_{\nu 0}) \right) \left(i \left| \vec{d}_{n',n}^{(k)} \right| I \delta_{\mu 0} + \left| \vec{B}_{n',n}^{(k)} \right| \sigma_\mu (1 - \delta_{\mu 0}) \right) I_{n'n} \right\}, \quad (1)$$

$$I_{n'n} = \int d\vec{p} \frac{f(E_n, p) - f(E_{n'}, p + q)}{-\hbar z + E_n(p) - E_{n'}(p + q)}, \quad (2)$$

где \vec{p}, \vec{q} обозначают импульсы электрона; $n(n')$ указывает номер зоны; z — комплексная частота; $|\chi_n\rangle$ и $\langle\chi_n|$ — кэт- и бра-биспиноры; $f(E_n, p)$ — распределение Ферми электронов по уровням с энергией $E_n(p)$; $C = C_{(2\pm\frac{1}{2}, 0)(2\pm\frac{1}{2}, 0)}^{2\pm\frac{1}{2}, 0}$ — коэффициент Клебша–Гордона; e_c — эксцентриситет атомного эллипсоида; e — заряд электрона; ε_0 — диэлектрическая постоянная; r_0 — радиус сферы, аппроксимирующей эллипсоид, с помощью которого моделируем атомные МТ-области; $\vec{\sigma}$ — оператор спина; $|\vec{d}_{n',n}|$ — модуль дипольного момента перехода между уровнями n', n ; $|\vec{B}_{n',n}|$ — модуль вектора напряженности магнитного поля для перехода $\vec{d}_{n',n}$, V_{BZ} — объем зоны Бриллюэна; θ_{qd} — угол между векторами $\vec{d}_{n',n}$ и \vec{q} ; Tr — операция взятия следа; \hbar — постоянная Планка; $\delta_{\nu\mu}$ — символ Кронекера, $\nu(\mu) = 0, \dots, 3$. Индекс k в данной ситуации различает два возможных случая: спин вверх и спин вниз. Первое слагаемое $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)free}(q, z)$ в (1) описывает поляризационный вклад свободных блоховских электронов (электроны в пределах одной зоны), а второе слагаемое $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)loc}(q, z)$ описывает поляризационные эффекты, обусловленные квадрупольной деформацией атомов кристаллическим полем (локализация блоховских электронов в результате межзонных переходов). Физический интерес представляют только диагональные элементы поляризационного оператора, которые определяют поляризацию за счет свободных блоховских электронов, дипольную и спиновозависимую поляризацию.

Рассмотрим детально спиновозависимую поляризацию. Учтем, что в приближении поля в дальней зоне [3] множитель в выражении (1) может быть записан в виде

$$\begin{aligned} |B_{n',n}^{(k)}| \sigma_\mu (1 - \delta_{\mu 0}) &\approx |B_{n',n}^{(k)}| \sigma_i \approx [\vec{d} \times \vec{r}] \cdot \vec{\sigma}_i / |\vec{r}| \approx \\ &\approx \vec{r} \cdot [\vec{\sigma} \times \vec{d}_{n',n}]_i / |\vec{r}| \approx e \langle \varphi_{n'} | \vec{r} \cdot [\vec{\sigma} \times \vec{e}^1]_i | \varphi_n \rangle, \quad \vec{e}^1 = \vec{r} / |r|, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\langle \varphi_{n'} | \vec{r} | \varphi_n \rangle$ — матричный элемент перехода. Отсюда следует, что в спиновозависимую часть поляризационного оператора $\Pi_{n;ij}^{(k)}(q, z)$ (1) входят выражения такого типа:

$$\Pi_{n;ij}^{loc} \sim e^2 \sum_{n'} \left(ie(r_0 e_c)^{1/2} \varphi_{n'} [\vec{\sigma} \times \vec{e}^1]_i \varphi_n^+ \right) \left(-ie(r_0 e_c)^{1/2} \varphi_n^+ [\vec{\sigma} \times \vec{e}^1]_j \varphi_{n'} \right) I_{n'n}. \quad (4)$$

Аналогично можно рассмотреть дипольную поправку в поляризационный оператор, оценив $|d_{n'n}|$ посредством выражения:

$$|d_{n'n}|^2 \approx e \sum_j [\vec{r} \cdot \vec{e}^1]_j^2. \quad (5)$$

Используя оценки, аналогичные (4) и (5), выпишем диагональную часть выражения (1), определяющую диэлектрическую проницаемость:

$$\begin{aligned} g^{\mu\nu} \Pi_{n;\nu\mu}^{loc} &\sim e^2 \sum_{n'} \left(e(r_0 e_c)^{1/2} e_i^1 + ie(r_0 e_c)^{1/2} \chi_{n'}^+ [\vec{\sigma} \times \vec{e}^1]_i \chi_n^+ \right) \times \\ &\times \left(e(r_0 e_c)^{1/2} e_i^1 - ie(r_0 e_c)^{1/2} \chi_n^+ [\vec{\sigma} \times \vec{e}^1]_i \chi_{n'}^+ \right) I_{n'n}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь χ_n — спиновая часть волновой функции электрона в n -м состоянии; $g_{\mu\nu}$ — метрический тензор. Введем обозначение:

$$A_i \sim e(r_0 e_c)^{1/2} q_i + ie(r_0 e_c)^{1/2} \chi^+ [\vec{\sigma} \times \vec{q}]_i \chi. \quad (7)$$

Тогда выражение (6) переписется в виде

$$g^{\mu\nu} \Pi_{n;\nu\mu}^{loc} \sim e^2 \sum_{n'} I_{n'n} A_i(q) A_j(q) \delta_{ij} / q^2. \quad (8)$$

Покажем, что вклад в поляризацию (8) каждой отдельной энергетической зоны кристалла может быть понят в терминах рассеяния на поле тяжелой частицы. Для этого достаточно убедиться, что если рассматривать рассеяние электронов в кристалле как рассеяние внешним полем атомного МТ-эллипсоида, то получающийся при этом поляризационный оператор $\Pi_{\nu\mu}$ также описывается выражением (1). Феймановская диаграмма (а) на рис. 1 описывает рассеяние электрона на тяжелой частице, являющейся в нашем случае МТ-эллипсоидом. Поляризация внешнего поля описывается феймановской диаграммой (б) на рис. 1 [2].

а б

Рис. 1. Рассеяние электрона на тяжелой частице (а) и поляризация внешнего поля (б)

Диаграмма (б) на рис. 1 отвечает тому, что поляризация обусловлена рождением электронно-"дырочных" пар, взаимодействующих во внешнем потенциале A_μ с фотонами, пропагатор которых обозначается штриховой линией. Тогда поляризационный оператор $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)free}(q, z)$ свободных (делокализованных) блоховских электронов можно представить в виде феймановской диаграммы, показанной на рис. 2,а, а поляризационный оператор $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)loc}(q, z)$ локализованных блоховских электронов можно представить в виде феймановских диаграмм, показанных на рис. 2,б. Согласно диаграмме на рис. 2,а оператор $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)free}(q, z)$ описывается выражением

$$\tilde{\Pi}_{\nu\mu}^{free} \sim \sum_{p_1, p_2} (|u(p_1)\rangle \gamma_0 \langle u(p_1 + q)|)^\dagger e \gamma_\nu e \gamma_\mu |u(p_2)\rangle \gamma_0 \langle u(p_2 + q)| = \frac{1}{2} (\gamma_\nu \gamma_\mu + \gamma_\nu \gamma_\mu) e^2 = e^2 \delta_{\mu\nu}. \quad (9)$$

Из рис. 2,б следует, что поляризационный оператор $\Pi_{n;\nu\mu}^{(k)loc}(q, z)$ содержит две диаграммы поляризации поля МТ-эллипсоида. Мы можем рассматривать внутреннюю часть диаграммы на рис. 2,б, которая не существует для процесса на рис. 2,а, как изменение внешнего поля в результате рождения виртуальных пар. Следовательно, феймановский поляризационный оператор $\tilde{\Pi}_{\nu\mu}^{loc}$ можем записать посредством вектор-потенциала A_i , создаваемого током атомного МТ-эллипсоида как

$$\begin{aligned}
g^{\mu\nu} \tilde{\Pi}_{\nu\mu}^{loc} &\sim \sum_{p_1, p_2} (|u(p_1)\rangle \gamma_0 \langle u(p_1+q)|)^\dagger e \gamma_\nu A_\nu(q) e \gamma_\mu A_\mu(q) |u(p_2)\rangle \gamma_0 \langle u(p_2+q)| / q^2 = \\
&= \frac{1}{2} (\gamma_\nu \gamma_\mu + \gamma_\nu \gamma_\mu) e^2 A_\nu(q) A_\mu(q) / q^2 = e^2 A_\nu(q) A_\mu(q) \delta_{\mu\nu} / q^2.
\end{aligned} \tag{10}$$

a *б*

Рис. 2. Диаграммы Фейнмана для поляризационного оператора свободных (*a*) и локализованных (*б*) блоховских электронов

Сравнивая (8) и (10), убеждаемся, что можем рассматривать вклад в поляризацию каждой отдельной энергетической зоны как поляризацию в поле тяжелой частицы (атомного МТ-эллипсоида).

Несферической части поляризационного оператора (1) сопоставляется диаграмма, показанная на рис. 2,б. Отсюда следует, что корреляционное взаимодействие локализованных блоховских электронов в кристаллах может быть описано в терминах диаграмм Фейнмана, представленных на рис. 3 [4]. Осевая линия разделяет диаграмму на рис. 3,б на две поддиаграммы, описывающие поляризацию внешнего поля тяжелой частицы. Это означает, что поляризация в кристаллах происходит как за счет скоррелированности движения электронов в кристаллах (рис. 3,а), так и за счет рождения электронно-"дырочных" пар во внешнем вектор-потенциале, создаваемом током атомного МТ-эллипсоида (рис. 3,б).

Релятивистская поляризация в поле ядра

Полученные результаты описывают рассеяние электрона на атоме в кристалле. Далее мы покажем, как можно физически интерпретировать формальные параметры r_0, ε_c в (1). Как известно [2], амплитуда рассеяния свободных электронов тяжелой частицей, которая описывается фейнмановской диаграммой на рис. 1,а, имеет вид

$$e \bar{u}(p_2) \gamma_\mu u(p_1) A_\mu(q), \quad A_\mu(q) = \frac{Ze}{q^2} T_\mu(q), \tag{11}$$

где $T_\mu(q)$ — фурье-компонента макроскопического тока тяжелой частицы, $A_\mu(q)$ — фурье-компонента 4-мерного потенциала, определяемая как

$$A_0 = Ze \frac{1}{q^2}, \quad A_i = Ze \frac{q_i}{2M} + Ze i \chi^\dagger \frac{[\vec{\sigma} \times \vec{q}]_i}{2M} \chi; \tag{12}$$

$u(p)$ — биспинорная волновая функция свободного электрона; M — масса тяжелой частицы; Ze — заряд тяжелой частицы. Сравнивая выражения (7) и (12), находим, что величина $(r_0 \varepsilon_c)^{-1/2}$ может быть с точностью до коэффициента отождествлена с массой атомной области кристалла.

a

б

Рис. 3. Поляризационная фейнмановская диаграмма рассеяния локализованных блоховских электронов: *a* — поляризация за счет скоррелированности движения электронов, *б* — поляризация за счет рождения электронно- "дырочных" пар

В кристалле наряду с рассеянием электронов на атомах имеет место рассеяние на ядрах атомов. Так как ядро является тяжелой частицей, а электрон налетает на него с большой скоростью, то в системе покоя электрона кулоновское поле ядра приобретает эллипсоидальную форму за счет сжатия в направлении движения. Эллипсоидальная форма поля ядра приводит к возникновению тока (11) и к поляризации вакуума за счет электронно-позитронных пар подобно тому, как эллипсоидальная форма атома кристалла приводит к поляризации диэлектрика за счет электронно-"дырочных" пар. Пусть $(-eZ_c)$ — заряд ядра. Очевидно, мы можем выразить $(r_0\epsilon_c)^{-1/2}$ через Z_c масс m_e электрона: $(r_0\epsilon_c)^{-1/2} \sim Z_c m_e$. Тогда простой расчет с помощью выражений (7), (12) показывает, что эффекты рассеяния электронов на ядрах, впервые оцененные Вайцекером и Вильямсом, более чем в 10 раз (для тяжелых элементов) слабее поляризационных эффектов деформации атомов кристаллическим полем. Если принять аппроксимации $|\vec{r}| \sim r_0$ и $-er_0 \sim Z_c$, то эффект рассеяния электронов на тяжелых ядрах слабее рассеяния на МТ-эллипсоидах в 1000 раз. Поэтому в зонных расчетах эти эффекты можно не учитывать.

RELATIVISTIC POLARIZATION IN CELL POTENTIAL APPROXIMATION AND SCATTERING OF ELECRONS ON NUCLEI IN CRYSTALS

L.I. GURSKY, H.V. GRUSHEVSKAYA

Abstract

Within the framework of a method of cell potentials, scattering on atomic areas and nucleus of a crystal was examined by using Feynman diagram technique. It is shown, that the contribution to polarization of each separate energy band of a crystal can be described as scattering on a field of a heavy particle and the polarization operator was found.

Литература

1. Гурский Л.И., Грушевская Г.В. // Докл. БГУИР. 2004. № 2. С. 173–185.
2. Грибов В.Н. Квантовая электродинамика. Ижевск; М., 2001. 288 с.
3. Фок В.А. Начала квантовой механики. М., 1976.
4. Грушевская Г.В. // Низкораз. сис. 2: Физико-химия элементов и систем с низкоразмерным структурированием (получение, диагностика, применение новых материалов и структур): Сб. науч. работ / Под ред. С.А. Маскевича, В.Ф. Стельмаха, А.К. Федотова. Вып. 4. Гродно, 2004, С. 16–20.