

## ЭЛЕКТРОН-ФОНОННАЯ РЕЛАКСАЦИЯ В МЕТАЛЛАХ ПРИ НЕРАВНОВЕСНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ

**О.В. Сергеев, В.В. Стегайлов**

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,  
Москва, 125412, ул. Ижорская, д.13, строение 2*

### Аннотация

В работе с помощью методов теории функционала электронной плотности определяются температурные зависимости фактора электрон-фононного взаимодействия для Al, Ag и W. Показано, что эти зависимости могут описываться без учета изменения электронной структуры и фононных спектров только для электронных температур до 1 эВ. При более высоких температурах для всех исследованных металлов наблюдается увеличение жесткости решетки, а для серебра и вольфрама характерно также изменение электронной плотности состояний. Показано, что это необходимо учитывать при расчете электрон-фононного взаимодействия.

### ELECTRON-PHONON RELAXATION IN METALS UNDER NONEQUILIBRIUM EXCITATION OF THE ELECTRON SUBSYSTEM

In the present work we determine temperature dependencies of the electron-phonon coupling factor for Al, Ag and W using methods of the density functional theory. It is shown that these dependencies may be described without consideration of the change of the electronic structure and the phonon spectra only for electron temperatures below 1 eV. Under higher temperatures for all investigated metals the lattice hardening is observed, and for silver and tungsten it is also significant that the electronic density of states changes. It is necessary to take these changes into account in calculations of the electron-phonon coupling factor.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Описание неравновесных состояний вещества, для которых характерна высокая плотность, соответствующая плотности твердой фазы, вместе с высокой электронной температурой (так называемое Warm dense matter [1]), представляет большой интерес для трактовки многочисленных экспериментов, проводимых в этой области.

Такое состояние было получено, например, при взаимодействии коротких лазерных импульсов или ионных пучков с мишенями, а также в опытах по электровзрыву тонких металлических проволочек. Во всех этих случаях характерные времена воздействия настолько малы, что решеточная подсистема не успевает отреагировать на энерговыход, и сразу после воздействия ее температура фактически равна начальной (сотни К), тогда как электроны успевают прийти к термодинамическому равновесию и могут иметь температуру порядка нескольких эВ.

Такие системы показали ряд необычных свойств. Эволюция таких состояний зависит в первую очередь от характеристик электрон-решеточного взаимодействия. Скорость перекачки энергии между подсистемами непосредственно определяет время жизни неравновесного состояния. Поэтому расчет этой скорости представляет большой интерес.

В работе определяется зависимость параметров взаимодействия электронов с решеткой и времени релаксации от начальной электронной температуры после энерговыхода.

Теоретический подход к описанию электрон-фононного взаимодействия развит в теории сверхпроводимости [2]. Рассматривается так называемый фактор электрон-фононного взаимодействия  $G(T_e)$ :

$$\left. \frac{\partial E}{\partial t} \right|_{ep} = G(T_l - T_e)$$

для которого получено выражение

$$G(T_e) = \frac{\pi \hbar k_B \lambda \langle \omega^2 \rangle}{g(\varepsilon_F)} \int_{-\infty}^{\infty} g^2(\varepsilon) \left( -\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon,$$

где  $g(\varepsilon)$  – функция плотности электронных состояний при данной температуре;  $f(\varepsilon)$  – распределение Ферми;  $\langle \omega^2 \rangle$  – средний квадрат фононной частоты:

$$\langle \omega^2 \rangle \cong \int \omega F(\omega) d\omega / \int \frac{F(\omega) d\omega}{\omega}.$$

Здесь  $F(\omega)$  – функция плотности фононных состояний. Также в формулу для  $G$  входит параметр  $\lambda$ , который называется константой электрон-фононного взаимодействия.

Можно видеть, что изменение фактора электрон-фононного взаимодействия при изменении электронной температуры определяется несколькими факторами. Во-первых, изменяется форма распределения Ферми. Влияние этого фактора очень сильно зависит от зонной структуры вещества.

Кроме того, изменяется плотность электронных и фононных состояний. Первый фактор влияет на значение интеграла и определяет  $g(\varepsilon_F)$ , от второго зависит  $\langle \omega^2 \rangle$  в выражении для  $G$ . Изменение распределения Ферми записывается аналитически, зависимость плотности электронных или фононных состояний от температуры можно получить с помощью квантово-механических расчетов.

## 2. МОДЕЛЬ, МЕТОД РАСЧЕТА

В данной работе для определения параметров, входящих в выражение для  $G$ , используются результаты расчетов в пакете VASP [3]. Используется теория функционала электронной плотности, расчет плотности электронных состояний проводится для элементарной ячейки в два этапа: сначала самосогласованный расчет плотности заряда, затем несамосогласованный расчет плотности состояний с фиксированной плотностью заряда. Такой подход позволяет использовать так называемый тетраэдрический метод расчета частичных заселенностей, дающий большую точность при расчете плотности состояний.

Для расчета фоновых спектров и плотности фоновых состояний мы использовали утилиту PHON, в которой фоновые спектры рассчитываются по методу малых смещений [4]. Размер суперячейки при этом выбирался равным  $2 \times 2 \times 2$  элементарных ячейки, для расчета сил использовался VASP.

Расчеты проводились для алюминия, серебра и вольфрама для температур от 0 до 4 эВ. При больших температурах должны возбуждаться «внутренние» электроны, которые в модели представлены посредством псевдопотенциала, поэтому для получения корректных результатов в этой области необходимо явно задавать большее число валентных электронов (менять псевдопотенциал) или проводить полноэлектронный расчет.

## 3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Оценить вид температурной зависимости фактора электрон-фононного взаимодействия можно, не учитывая изменение зонной структуры и фоновых спектров. Результаты таких расчетов представлены, например, в работе Жигиля с соавторами [5]. При этом электрон-фононное взаимодействие определяется для каждой температуры только видом функции плотности электронных состояний, причем эта функция полагается неизменной. Величина  $\langle \omega^2 \rangle$ , определяемая по фоновой плотности состояний, принимается постоянной. Ниже будет показано, что такие ограничения существенно влияют на результат.

Приведем сначала результаты расчетов плотности электронных состояний для различных температур (рис.1–3).

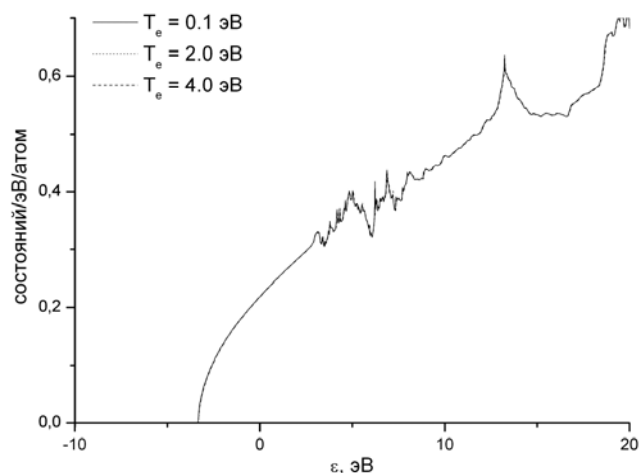


Рис. 1. Плотность электронных состояний для алюминия

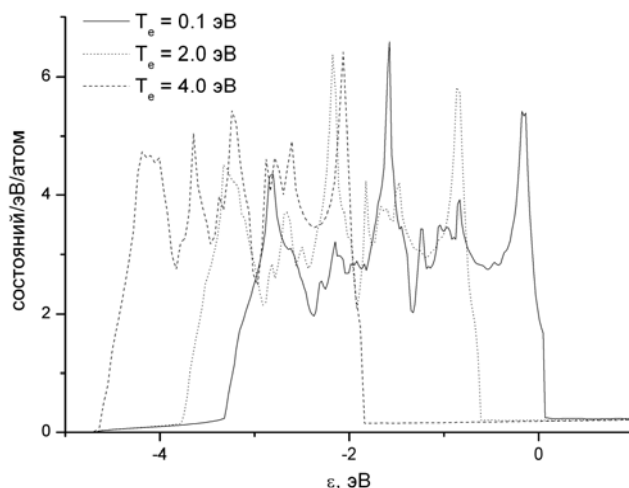


Рис. 2. Плотность электронных состояний для серебра

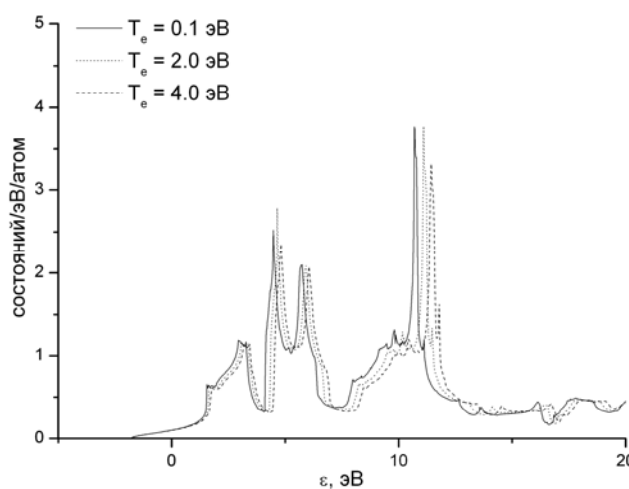


Рис. 3. Плотность электронных состояний для вольфрама

Видно, что плотность состояний в алюминии не изменяется с ростом электронной температуры, в серебре зона при нагреве смещается в сторону более низких энергий, а в вольфреме – более высоких. Это смещение меняет вид подынтегральной функции в выражении для  $G$ , внося поправку в температурную зависимость фактора электрон-фононного взаимодействия.

Влияние электронной температуры на фоновые спектры также различно (рис.4–6).

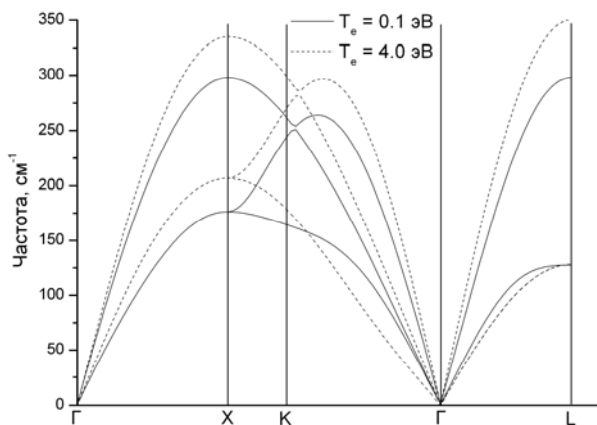


Рис. 4. Спектры фононов в алюминии (гцк-решетка)

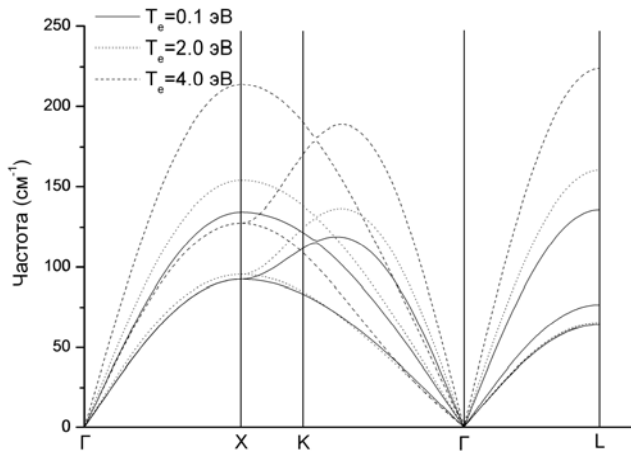


Рис. 5. Спектры фононов в серебре (гцк-решетка)

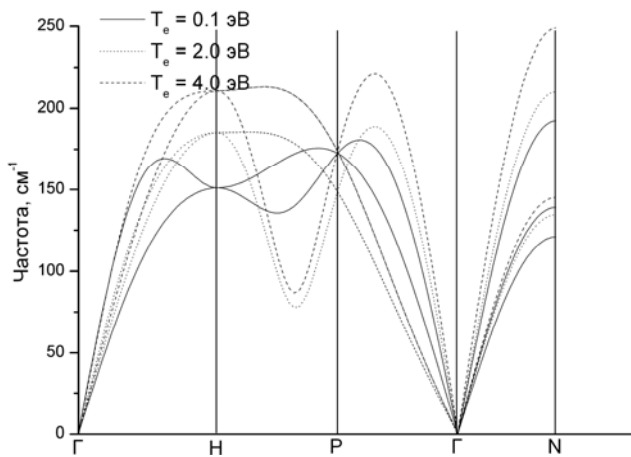


Рис. 6. Спектры фононов в вольфраме (оцк-решетка)

В целом для всех трех металлов наблюдается повышение жесткости решетки с увеличением электронной температуры, однако масштаб влияния этой температуры на фононный спектр различен. Если для алюминия повышение частоты при нагреве электронной подсистемы от нуля до 4 эВ составляет порядка 10%, то для вольфрама эта величина уже порядка 30%, а для серебра – 70%. Для вольфрама также заметно меняется форма дисперсионных кривых – появляется «яма» на одной из ветвей. Изменение дисперсии вызывает изменение фононной плотности состояний и, по формуле (3),  $\langle \omega^2 \rangle$ .

Посмотрим, какие результаты получаются для фактора электрон-фононного взаимодействия с учетом и без учета изменения рассчитанных параметров (рис.7–9).

Результаты расчетов до 2 эВ без учета изменения жесткости и электронной структуры согласуются с данными работы [5]. Видно также, что изменение электронной плотности состояний добавляет только малую поправку к фактору электрон-фононного взаимодействия, тогда как учет изменения фононных спектров сильно влияет на значение G. Можно утверждать, что для описания температур выше 1–2 эВ, с зависимости от металла, необходимо учитывать этот фактор.

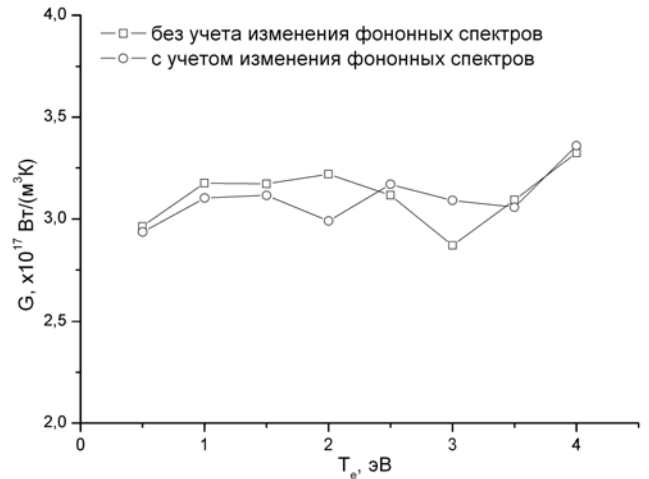


Рис. 7. Зависимость фактора электрон-фононного взаимодействия от температуры для алюминия

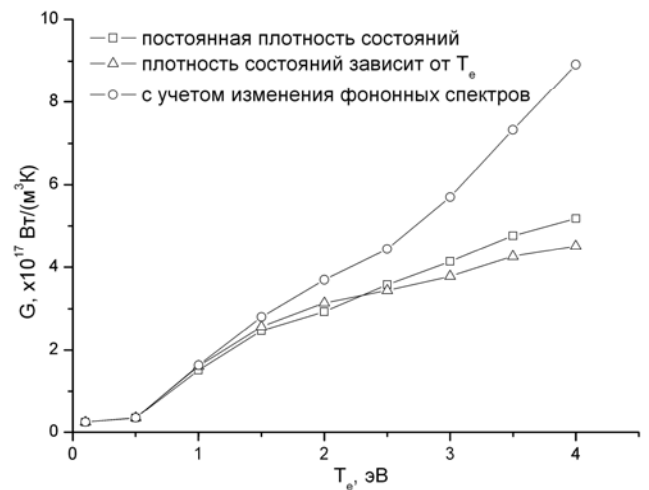


Рис. 8. Зависимость фактора электрон-фононного взаимодействия от температуры для серебра

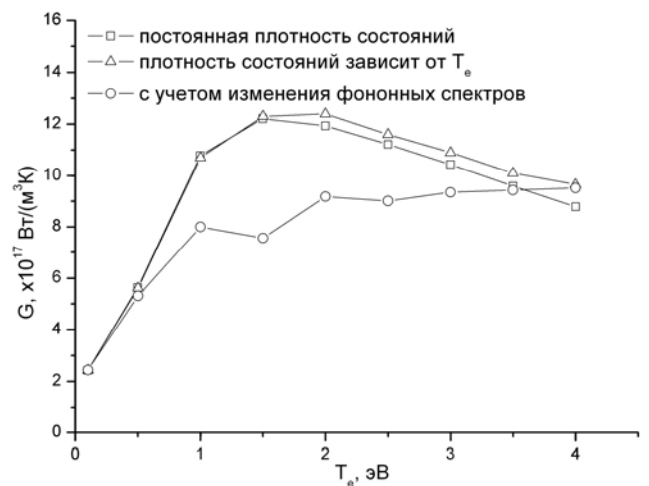


Рис. 9. Зависимость фактора электрон-фононного взаимодействия от температуры для вольфрама

Оценим время релаксации системы  $\tau$ .

$$\tau \sim \frac{\Delta E_0}{\left(\frac{\partial E}{\partial t}\right)_0} = \frac{C_l (T_e - T_l)(T_e - T_l)\big|_0}{G(T_e - T_l)\big|_0} = \frac{C_l}{G}$$

где  $C_l$  – решеточная теплоемкость единицы объема вещества. Если принять ее равной  $3R/V_m$ , получим для времени релаксации:

Al:

$$T_{e0} = 1 \text{ эВ} \quad 8.3 \times 10^{-12} \text{ с}$$

$$T_{e0} = 4 \text{ эВ} \quad 7.4 \times 10^{-12} \text{ с}$$

Ag:

$$T_{e0} = 1 \text{ эВ} \quad 1.4 \times 10^{-11} \text{ с}$$

$$T_{e0} = 4 \text{ эВ} \quad 2.8 \times 10^{-12} \text{ с}$$

W:

$$T_{e0} = 1 \text{ эВ} \quad 3.1 \times 10^{-12} \text{ с}$$

$$T_{e0} = 4 \text{ эВ} \quad 2.6 \times 10^{-12} \text{ с}$$

С увеличением начальной электронной температуры время релаксации уменьшается, что соответствует данным экспериментов, приведенным, например, в [1].

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассчитан фактор электрон-фононного взаимодействия для Al, Ag и W в диапазоне электронных температур 0.4 эВ. Показана существенная зависимость свойств вещества при быстром энергокладе от его электронной структуры. Для исследованных металлов оценено время релаксации, показано его убывание с ростом начальной электронной температуры.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. The formation of warm dense matter: experimental evidence for electronic bond hardening in gold. // *Science* 323. 2009. pp. 1033–1037.
2. W.L. McMillan. Transition temperature of strong-coupled superconductors. // *Phys. Rev.* 167. 1968. pp. 331–344.
3. G. Kresse and J. Hafner. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. // *Phys. Rev. B* 47. 1993. pp. 558–561.
4. D. Alfè. PHON: A program to calculate phonons using the small displacement method. // *Computer Physics Communications* 180. 2009. pp. 2622–2633.
5. Leonid V. Zhigilei et al. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium. // *Phys. Rev. B* 77. 2008. pp. 075133-1–075133-17.