

0-798151

На правах рукописи



Нечаев Илья Александрович

**Исследование динамики квазичастиц в трех- и
двумерных электронных системах в рамках
многочастичной теории возмущений**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Томск – 2012

Работа выполнена в *ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский государственный университет»*.

Научный консультант:

доктор физико-математических наук Чулков Евгений Владимирович

Официальные оппоненты:

Успенский Юрий Алексеевич, доктор физико-математических наук, ФГБУН «Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук», главный научный сотрудник;

Тютперев Валерий Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Томский государственный педагогический университет», зав. кафедрой общей физики;

Килин Виктор Андреевич, доктор физико-математических наук, доцент, ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», профессор кафедры высшей математики.

Ведущая организация:

ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук»

Защита состоится «15» ноября 2012 г. в 14³⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 в ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Автореферат разослан «9» октября 2012 г.

НАУЧНАЯ БИБЛИОТЕКА КФУ



0000741966

Ученый секретарь
диссертационного совета,

д.ф.-м.н., ст. науч. сотр.

ИВВ

Ивокин И. В.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. За последнее десятилетие значительно повысился интерес, проявляемый как с экспериментальной, так и теоретической стороны, к исследованию времени жизни τ возбужденных электронов и дырок в трех- и двумерных электронных системах [1]. Это объясняется тем, что динамика квазичастиц играет важную роль во многих физических и химических процессах. Так, например, величина τ , обратная которой представляет собой скорость затухания возбуждений и соответствует ширине квазичастичной спектральной функции, традиционно играет значимую роль в явлениях, основанных на транспорте носителей заряда и спина. Совместно со скоростью квазичастиц время жизни определяет длину свободного пробега – важную характеристику динамики квазичастиц в многоэлектронной системе. Среди современных экспериментальных методов, развитых для такого рода исследований, наиболее мощным является метод двухфотонной фотоэмиссионной спектроскопии с временным разрешением (2Ф-ФЭС-ВР). Этот метод делает возможным прямое измерение времени жизни возбужденных квазичастичных состояний в металлах с временным разрешением порядка нескольких фемтосекунд. Полное понимание того, какие процессы определяют величину, измеряемую в ходе таких экспериментов, еще не достигнуто, однако ясно, что необходимо более точное описание времени жизни элементарных возбуждений, чем то, которое дает подход свободных электронов.

В последнее время большинство первопринципных расчетов времени жизни τ квазичастиц в реальных системах проводится в рамках так называемого G_0W_0 приближения [2], которое пренебрегает вершинными поправками как для поляризационной функции, так и для собственной энергетической части. В этом приближении последняя представляется как произведение функции Грина, соответствующей одночастичному уравнению Хартри или Кона-Шема, и найденного с использованием этой функции в рамках приближения хаотических фаз (ПХФ) экранированного кулоновского взаимодействия. В недавнем прошлом такого рода расчеты были проведены для некоторых простых и благородных металлов, $3d$ -ферромагнитных и некоторых $4d$ - и $5d$ -переходных металлов. Эти расчеты, использующие различные методы нахождения одноэлектронного энергетического спектра, показали, что в случае простых металлов учет реальной зонной структуры приводит к зависимости времени жизни квазичастиц от энергии возбуждения ω близкой к той, которая получается в модели свободных электронов – $\tau \sim \omega^{-2}$. Ситуация несколько меняется в случае благородных металлов из-за наличия ниже (~ 2 eV) уровня Ферми E_F полностью заполненной d -зоны. Но в силу того, что простые и благородные металлы обладают качественно схожей зонной структурой и плотностью электронных состояний (ПЭС) в области E_F , и здесь время жизни демонстрирует ожидаемую зависимость от энергии возбуждения. Однако это не так в случае переходных металлов, где E_F находится в пределах локализованных состояний d -зоны, которая, в свою очередь, сильно меняется при движении вдоль d -периодов. Проведенные единичные расчеты показали, что полученные времена жизни также сильно меняются, следуя тенденции, наблюдаемой в электронной структуре. Однако систематического рассмотрения различных металлов, а тем более их сплавов и соединений, на предмет выявления закономерностей в изменениях времени жизни квазичастичных возбуждений при движении как в рамках той или иной группы, так и вдоль периодов таблицы Менделеева проведено не было.

Важную часть указанного выше рассмотрения составляет исследование свойств квазичастиц в ферромагнитных металлах и их сплавах. Дело в том, что интенсивное развитие нового направления в прикладной физике – спиновой электроники (спинтроники) – привело к созданию целого спектра магнитоэлектронных устройств, функциональность которых

базируется на спин-зависимом транспорте возбужденных электронов и дырок в ферромагнитных материалах [3]. Ранее анализ времени жизни и соответствующей средней длины свободного пробега квазичастиц проводился лишь в чистых ферромагнитных металлах. Было отмечено, что при описании времени жизни в ферромагнитных системах важен учет дополнительных каналов затухания элементарных возбуждений, связанных с флуктуациями спиновой плотности, что возможно лишь при выходе за пределы G_0W_0 приближения. Однако для изучения различных эффектов в тонкопленочных гетероструктурах наиболее часто используются не чистые ферромагнитные металлы, а их сплавы Co_xFe_{1-x} (как правило, с большим x) и Ni_xFe_{1-x} (в основном с $x \approx 0.8$), тонкие слои которых выступают в качестве спиновых фильтров. Характеристики таких фильтров зависят от толщины слоев и от их состава. Расчет этих характеристик «из первых принципов» для ферромагнитных сплавов, в отличие от чистых металлов Fe, Co и Ni, даже на уровне G_0W_0 приближения представляет собой труднореализуемую задачу. Поэтому, несмотря на тот факт, что упоминание приближения не учитывает вклад отмеченных выше каналов затухания, изучение G_0W_0 -свойств квазичастиц в ферромагнитных сплавах позволит значительно продвинуться в понимании факторов влияния на спиновую асимметрию времени жизни и средней длины свободного пробега квазичастиц, а также оценить вклад этой асимметрии в наблюдаемое на эксперименте поведение длины затухания как функции энергии возбуждения.

Дополнительно отметим, что несмотря на то, что в настоящее время достигнут существенный прогресс как в экспериментальном, так и теоретическом изучении спектра элементарных возбуждений в различных электронных системах, тем не менее, детальное понимание механизмов затухания и более полное описание процессов рассеяния, вовлеченных в формирование наблюдаемой ширины спектральной функции квазичастиц остается актуальной задачей. До сих пор осуществляются попытки учесть влияние флуктуаций спиновой плотности [4, 5] в дополнение к включенным в рассмотрение в рамках G_0W_0 приближения каналам затухания, связанным с флуктуациями зарядовой плотности. Дело в том, что благодаря соответствию между многократным электрон-дырочным рассеянием и флуктуациями спиновой плотности [6, 7] существует возможность учета соответствующих каналов затухания путем включения в рассмотрение лестничных диаграмм разложения собственно-энергетической части по голому или экранированному кулоновскому взаимодействию. Существующие в литературе подходы либо не реализуемы в том виде, в котором они представлены, в приложении к реальным системам, либо содержат подгоночные параметры или величины, определяемые за пределами предлагаемого подхода. Все это делает актуальной разработку реализуемого на практике метода, выходящего за пределы G_0W_0 приближения, но сохраняющего при этом все достоинства последнего.

Сегодня большой интерес для спинтроники представляют также двумерные электронные системы, которые образуют, например, электроны поверхностных состояний металлов и электроны в гетеропереходах или в сверхтонких слоях металлов на диэлектрической подложке. В таких системах наиболее ярко проявляет себя спин-орбитальное взаимодействие, вызванное структурной инверсионной асимметрией потенциала, ограничивающей электронную систему в направлении, перпендикулярном плоскости залегания этой системы (так называемый вклад Рашбы). Величиной вклада Рашбы можно управлять, например, изменением стехиометрии поверхностного сплава [8] или приложенным электрическим полем (как, например, в полевом спиновом транзисторе) [9]. Наличие такого взаимодействия предоставляет возможность манипулировать спином электрона без использования внешнего магнитного поля, что положительно сказывается на размерах и функциональности устройств долинпроводниковой спинтроники. С точки зрения квазичастичных свойств, спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению элек-

тронного спектра, что в свою очередь может модифицировать время жизни квазичастиц, полученное без учета спин-орбитального взаимодействия. В связи с использованием таких двумерных электронных систем при разработке современных электронных приборов полупроводниковой спинтроники, изучение квазичастичной динамики в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием становится актуальным. Тем более что такого рода исследования не проводились даже в рамках G_0W_0 приближения, не говоря о подходах, выходящих за пределы этого приближения.

Естественным обобщением рассмотрения двумерных электронных систем со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы является учет дополнительного вклада Дрессельхауза, обусловленного объемной инверсионной асимметрией, присутствующей в полупроводниковых гетероструктурах, созданных на основе материалов со структурой цинковой обманки. Величина вклада Дрессельхауза зависит от материала и геометрии выращивания гетероструктур. При совместном действии вклады Рашбы и Дрессельхауза приводят к спиновому расщеплению, зависящему как от величины, так и от ориентации двумерного волнового вектора электрона k . Особо выделяется случай, когда вклады компенсируют друг друга, и двумерная электронная система представляет собой две несвязанные спиновые компоненты, каждая из которых демонстрирует свойства, присущие электронной системе без спин-орбитального взаимодействия. Такой случай примечателен различными эффектами, достаточно подробно рассмотренными в литературе [10, 11]. Наиболее обсуждаемые процессы при рассмотрении динамики электронов и дырок в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и Дрессельхауза – это спиновая релаксация и расфазировка спинов [3]. Как следствие, соответствующие характерные времена этих процессов достаточно хорошо изучены. Однако, такое свойство квазичастиц, как время жизни τ остается недостаточно изученным для указанных систем.

Таким образом, возникает ряд актуальных проблем в области исследования свойств квазичастиц как в парамагнитных, так и спин-поляризованных трехмерных системах, а также двумерных электронных системах, где электронные состояния расщеплены по спину за счет спин-орбитального взаимодействия. Мотивация решения подобных проблем лежит не только в области фундаментального понимания механизмов затухания элементарных возбуждения в конденсированных средах, но также вызвана развитием современных технологий, стремящихся к миниатюризации, снижению энергопотребления и расширению функциональности создаваемых устройств.

Цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании влияния особенностей электронно-энергетической и спиновой структуры трех- и двумерных электронных систем на свойства элементарных возбуждений в этих системах. Данная проблема рассмотрена на основе решения актуальных задач физики конденсированного состояния, которые могут быть сформулированы следующим образом:

1. Исследовать в единых приближениях динамику квазичастиц в парамагнитных переходных металлах на предмет выявления закономерностей в изменениях свойств элементарных возбуждений при движении как в рамках d -периодов, так и в рамках той или иной группы таблицы Менделеева.
2. Проанализировать зависимость обусловленного неупругим электрон-электронным рассеянием конечного времени жизни и соответствующей средней длины свободного пробега квазичастиц от энергии возбуждения в ферромагнитных чистых металлах и соединениях систем Co-Fe и Ni-Fe. Исследовать влияние степени спиновой поляризации состояний, состава и кристаллической структуры на указанные свойства квазичастиц. Оценить вклад неупругого электрон-электронного рассеяния в эффект

спинового фильтра, экспериментально наблюдаемого в спин-зависимом транспорте электронов в ферромагнитных материалах.

3. Разработать реализуемый на практике метод, выходящий за пределы G_0W_0 приближения путем учета вклада многократного рассеяния в свойства квазичастиц и не использующий модельных параметров, а также величин, определяемых за пределами метода. Провести сравнение разработанного метода с уже существующими в литературе подходами к описанию свойств элементарных возбуждений в многоэлектронных системах.
4. С помощью разработанного метода изучить влияние многократного электрон-дырочного рассеяния на свойства квазичастиц как в модельных однородных электронных системах, так и в реальных кристаллических твердых телах.
5. Реализовать G_0W_0 приближение и провести исследования квазичастичной динамики в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием, обусловленным структурной и объемной инверсионной асимметрией.

Методы исследования. Решение поставленных задач проводилось в рамках многочастичной теории возмущений с использованием как первопринципного метода расчета электронной структуры, основанного на теории функционала электронной плотности, так и модели «желе». В первопринципных расчетах для нахождения энергетического спектра исследуемых систем применялся метод линейаризованных muffin-tin орбиталей (ЛМТО). При *ab initio* вычислениях собственной энергии как в рамках широко применяемого G_0W_0 приближения, так и в рамках предложенного в работе метода использовался так называемый product-базис, который строился на парных произведениях ЛМТО, локализованных на одном и том же узле решетки. В применении к «желе» детально анализировалось влияние многократного электрон-дырочного рассеяния на свойства квазичастиц и проводилось сравнение предложенного метода с существующими в литературе методами приближенного вычисления собственной энергии квазичастиц. Для учета спин-орбитального взаимодействия в двумерных электронных системах использовались модельные гамильтонианы Рашбы и Дрессельхауза.

Научная новизна заключается в том, что в работе впервые в рамках систематических исследований на основе проведенных первопринципных расчетов времени жизни квазичастиц τ в G_0W_0 приближении выявлены закономерности в изменении поведения времени жизни квазичастиц как функции энергии возбуждения при переходе от одного парамагнитного переходного металла к другому как в пределах одной группы, так и вдоль d -периодов таблицы Менделеева. Из сравнения с экспериментальными данными, полученными методом двухфотонной фотоэмиссионной спектроскопии с временным разрешением, делается предположение о том, что выявленные закономерности носят фундаментальный характер и не претерпят значительных изменений при выходе за пределы G_0W_0 приближения. Впервые с использованием *ab initio* G_0W_0 расчетов на примере ферромагнитных соединений систем Co-Fe и Ni-Fe показано влияние степени спиновой поляризации, состава и кристаллической структуры на спиновую асимметрию времени жизни и средней длины свободного пробега квазичастиц. Это позволило оценить вклад электрон-электронного неупругого рассеяния в эффект спинового фильтра, экспериментально наблюдаемого в спин-зависимом транспорте электронов в ферромагнитных материалах. В рамках оригинального метода вычисления собственной энергии квазичастиц впервые проведен анализ влияния многократного электрон-дырочного рассеяния на свойства квазичастиц как в модельных однородных системах в широком интервале значений параметра электронной

плотности, так и в реальных металлах с помощью первопринципных расчетов. Установлено, что предложенный метод позволяет достичь хорошего согласия с экспериментальными данными. В работе впервые реализовано G_0W_0 приближение и разработан комплекс программ для проведения исследования времени жизни квазичастиц в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием, обусловленным как структурной, так и объемной инверсионной асимметрией. Описано поведение указанной величины в системах со слабым и сильным спиновым расщеплением. Показано, что в системах со слабым спиновым расщеплением изменения, индуцированные спин-орбитальным взаимодействием, пренебрежимо малы, за исключением изменений в области затухания за счет эмиссии плазмона. В случае систем с сильным спиновым расщеплением предсказана спиновая асимметрия времени жизни и средней длины свободного пробега электронов, величина которой может управляться внешним электрическим полем. Для более реалистичного рассмотрения динамики квазичастиц в двумерных системах со спин-орбитальным взаимодействием впервые была модифицирована модель повторяющихся тонких пленок с одномерным псевдопотенциалом [12] на случай проведения G_0W_0 расчетов ширины спектральной функции квазичастиц в расщепленном спин-орбитальным взаимодействием поверхностном состоянии. На примере «подправленной» для усиления расщепления поверхностного состояния поверхности Au(111) показано, что в процессы затухания дырок вовлекается акустический поверхностный плазмон, существование которого недавно было предсказано теоретически [13], а затем подтверждено экспериментально [14].

В целом совокупность полученных в работе результатов и выводов составляет основу нового решения задачи по описанию динамики квазичастиц в трех- и двумерных электронных системах в рамках фундаментальной научной проблемы поиска новых материалов и создания наноструктур для обеспечения эффективного транспорта носителей заряда и спина в спинтронике.

Научная и практическая ценность определяется прежде всего тем, что результаты проведенных исследований расширяют и углубляют понимание основных процессов затухания, связанных с электрон-электронным неупругим рассеянием, а также факторов влияния на эти процессы в парамагнитных и ферромагнитных металлах и их соединениях. Такое понимание является технологически востребованным, так как позволяет прогнозировать свойства транспорта носителей заряда и спина, включая время жизни и среднюю длину свободного пробега этих носителей, для целенаправленного поиска оптимальных параметров создаваемых устройств спинтроники. Для более точного описания данных, получаемых в рамках экспериментальных методик, используемых при исследовании динамики носителей заряда и спина, в работе предложен и реализован метод вычисления свойств элементарных возбуждений в электронных системах, позволяющий учитывать флуктуации как зарядовой, так и спиновой плотности. Полученные в работе результаты также существенно расширяют представления о динамике квазичастиц в двумерных электронных системах как со слабым, так и с сильным спиновым расщеплением, индуцированным спин-орбитальным взаимодействием. Кроме этого результаты могут быть использованы для правильной интерпретации фотоэмиссионных спектров с временным и/или угловым разрешением, полученных для указанных систем. В случае систем с сильным спиновым расщеплением предсказанная управляемая электрическим полем спиновая асимметрия времени жизни возбужденных электронов открывает перспективы для практического применения таких систем в спинтронике. Наконец, в целом полученные результаты исследования, разработанные численные методики и комплексы программ могут быть использованы для обучения студентов и аспирантов по специальности физика конденсированного состояния.

Достоверность научных выводов и результатов достигается корректностью постановки решаемых задач и их физической обоснованностью. применением современных методов теоретического исследования как в рамках многочастичной теории возмущений, так и в рамках теории функционала электронной плотности, соответствием полученных результатов и установленных закономерностей данным других теоретических исследований, а также хорошим согласием с известными экспериментальными данными.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. В результате систематического *ab initio* исследования, проведенного в рамках G_0W_0 приближения, выявлены закономерности в изменении свойств квазичастиц, а также установлены основные факторы влияния на:
 - энергетическую зависимость времени жизни квазичастиц в кубических парамагнитных переходных металлах разных d -периодов таблицы Менделеева (V, Nb, Ta, Mo, W, Rh, Ir);
 - спиловую асимметрию времени жизни, скорости и средней длины свободного пробега квазичастиц в ферромагнитных чистых металлах (Co, Fe, Ni) и соединениях систем Co-Fe ($B2-CoFe$, $D0_3-Co_3Fe$) и Ni-Fe ($L1_0-NiFe$, $L1_2-Ni_3Fe$).
2. Разработан и реализован метод вычисления собственной энергии квазичастиц, основанный на полученном в локальном приближении вариационном решении уравнения Бете-Солпитера, определяющего двухчастичную амплитуду рассеяния (T -матрицу) в лестничном приближении. Результирующее выражение для T -матрицы аналогично таковому в подходах, основанных на использовании модельных гамильтонианов, но, в отличие от последних, вместо модельных параметров содержит локальное взаимодействие, зависящее от импульса и определяемое экранирующими свойствами изучаемой системы. В случае многократного электрон-дырочного рассеяния локальное взаимодействие может быть связано с обменной частью многочастичного фактора локального поля, учитывающего эффекты обменно-корреляционной дырки в линейном отклике системы.
3. С помощью разработанного метода обнаружено, что в широком интервале значений электронной плотности в модели «желе» влияние учета многократного электрон-дырочного рассеяния на свойства квазичастиц в сравнении с результатами G_0W_0 приближения выражается в уменьшении времени жизни, модификации дисперсии энергии квазичастиц (зона шире, чем в G_0W_0 приближении, но уже, чем в не взаимодействующей системе), понижении спектрального веса и увеличении эффективной массы квазичастиц. В случае *ab initio* расчетов совместный учет многократного электрон-дырочного рассеяния и эффектов реальной зонной структуры заметно улучшает согласие с экспериментальными данными как по закону дисперсии и ширине линии плазмона, так и по времени релаксации фотовозбужденных электронов.
4. В рамках G_0W_0 приближения установлено, что в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием, обусловленным структурной (вклад Рашбы) и объемной (вклад Дрессельхауза) инверсионной асимметрией, в случае слабого спинового расщепления ширина спектральной функции квазичастиц как функция энергии возбуждения пренебрежимо мало отличается от таковой в двумерной электронной системе без спин-орбитального взаимодействия. Заметные отличия наблюдаются лишь в области появления дополнительного к образованию электрон-дырочных пар

канала затухания за счет эмиссии плазмона. В случае сильного спинового расщепления проявляет себя значительная спиновая асимметрия времени жизни и средней длины свободного пробега электронов, и появляется плазменный канал затухания дырок.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях: Exciting Symposium 2005 on Excited-state properties of solids, May 16-19, 2005, Mannheim, Germany; "ECOSS-05" European Conference on Surface Science 2005, September 4-9, 2005, Berlin, Germany; Psi-k 2005 Conference, September 17-21, 2005, Schwäbisch Gmünd, Germany; 26th Brandt-Ritchie Workshop, July 16-18, 2006, Paris, France; "ACSIN-10" 10th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures, September 21-25, 2009, Granada, Spain; "3K2010" Wilhelm and Else Heracus Seminar: "Rashba and related spin-orbit effects in metals", January 6-8, 2010, Physikzentrum Bad Honnef, Germany; XVI Международный симпозиум «Нанозлектроника», Март 12-16, 2012, г. Нижний Новгород, Россия.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 15 статей в рецензируемых журналах, удовлетворяющих критериям ВАК.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автором сделан определяющий вклад при постановке решаемых задач, разработке путей и методов их решения, проведении непосредственных расчетов, совместном обсуждении и интерпретации полученных результатов. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 234 страницы, из них 202 страницы текста, включая 70 рисунков. Библиография включает 256 наименований на 32 страницах.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и задачи работы, аргументирована научная повязка исследований, показана научная и практическая ценность полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения, дана краткая характеристика основных разделов диссертации.

В первой главе дается краткое описание существующих теоретических подходов к изучению динамики квазичастиц, которые отличаются друг от друга уровнем физической проработки электрон-электронного взаимодействия.

В первом разделе указывается, что в рамках современной квантовой теории конденсированного состояния вещества изучение свойств элементарных возмущений, как правило, основывается на решении замкнутой системы связанных интегральных уравнений, известных как уравнения Хединга [15]. Эти уравнения связывают функцию Грина изучаемой системы G , собственную энергию квазичастицы (массовый оператор за минусом потенциала Хартри) Σ , поляризационную функцию P , динамически экранированное кулоновское взаимодействие W и вершинную функцию Λ . Сложность решения уравнений Хединга заключается в том, что указанные величины, выражаясь друг через друга, содержат нетривиальные функциональные производные, что делает практически невозможным ее численное решение. Поэтому возникает необходимость поиска приближенных функциональных соотношений с более простой зависимостью.

В разделе рассмотрены известные в литературе методы приближенного вычисления собственно-энергетической части Σ , отражающие современное положение дел в области

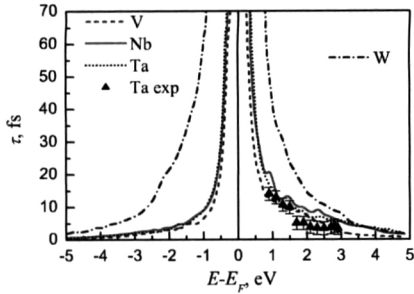


Рис. 1. Зависимость усредненного по k времени жизни квазичастиц от энергии возбуждения в V, Nb, Ta и W. Экспериментальные данные 2Ф-ФЭС-ВР для Ta взяты из работы [17].

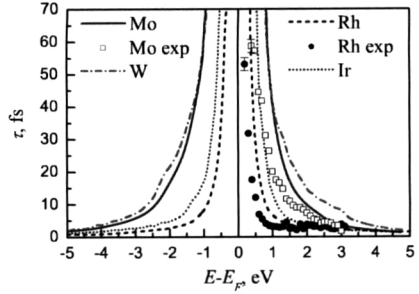


Рис. 2. Зависимость усредненного по k времени жизни квазичастиц от энергии возбуждения в Mo, W, Rh и Ir. Экспериментальные данные 2Ф-ФЭС-ВР для Mo и Rh взяты из работы [A4].

изучения квазичастичной динамики в конденсированных средах. Дается описание каждого из рассматриваемых методов, начиная с хорошо известного G_0W_0 приближения, где также представлены детали и основные параметры первопринципных расчетов, проводимых в работе в рамках этого приближения. Далее, двигаясь через различные методы учета вкладов от флуктуаций зарядовой и спиновой плотности, раздел заканчивается рассмотрением так называемого обобщенного G_0W_0 приближения [4]. В набор рассматриваемых методов включены как приближения, которые учитывают указанные выше вклады посредством спин-симметричных и спин-антисимметричных многочастичных факторов локального поля, так и методы, которые основываются на использовании модельного экранированного взаимодействия.

Во втором разделе главы приведено краткое изложение предложенной в работе [16] модификации концепции Хедина на случай квантовых систем со спин-зависимым взаимодействием. Отмечается необходимость такой модификации для изучения свойств квазичастиц в электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием. Представлены соотношения, определяющие основу G_0W_0 приближения для указанных систем.

В третьем разделе сформулированы выводы к первой главе.

Во второй главе представлены результаты проведенных в рамках G_0W_0 приближения систематических *ab initio* исследований свойств квазичастиц как в кубических парамагнитных переходных металлах разных d -периодов (V, Nb, Ta, Mo, W, Rh, Ir), так и в ферромагнитных чистых металлах (Co, Fe, Ni) и их соединениях (CoFe, Co₃Fe, NiFe и Ni₃Fe со структурами B2, D0₃, L1₀ и L1₂ соответственно). Указаны причины такого выбора материалов и обоснована актуальность подобных исследований. Отмечается, что соответствующие *ab initio* вычисления стали возможными благодаря проведенному автором распараллеливанию имеющихся программ, реализующих G_0W_0 приближение для исследования реальных систем, и, как следствие, использованию высокопроизводительных вычислительных кластеров. Все результаты, представленные во второй главе, опубликованы в работах [A3, A5, A6, A11, A14].

В первом разделе главы представлены результаты вычисления времени жизни квазичастиц τ в парамагнитных переходных металлах (рис. 1 и 2) и выявленные на основе их анализа закономерности в изменениях $\tau(\omega)$ при движении как в рамках одной группы, так и вдоль d -периодов таблицы Менделеева. Поскольку при анализе и интерпретации

получаемых экспериментальных данных, как правило, делается попытка использовать упрощенные схемы, базирующиеся на представлениях о фазовом пространстве, обращается внимание на влияние формы, ширины и заполнения d -зоны на поведение $\tau(\omega)$. Прежде всего отмечается, что элементы группы V-Nb-Ta (рис. 1), имеющие схожую зонную структуру, демонстрируют близкие значения для усредненного времени жизни. В этом смысле, следуя за плотностью электронных состояний (ПЭС), ниобий и тантал наиболее близки. Ванадий здесь показателен тем, что он, обладая заметно более узкой d -зоной и большими в среднем значениями ПЭС, характеризуется более короткими временами жизни квазичастиц. При переходе от тантала к вольфраму, сопровождаемом изменением заполнения зон и сдвигом уровня Ферми в область минимума ПЭС, в целом наблюдается резкое увеличение τ . Особенно ярко это проявляется в области дырочных возбуждений. В отношении других рассмотренных групп (Mo-W или Rh-Ir) также отмечается близость значений времени жизни квазичастиц для металлов одной группы (см. рис. 2). Указано, что при переходе от ОЦК металлов центров $4d$ - и $5d$ -периодов с узкой ПЭС в области E_F к ГЦК металлам концов этих периодов с E_F вблизи пика ПЭС наблюдается эффект, обратный отмеченному выше при рассмотрении перехода от Ta к W.

Экспериментальные данные, приведенные на рис. 1 и 2 для тантала, молибдена и родия, представляют собой время релаксации возбужденных электронов. При сопоставлении теоретических и экспериментальных данных отмечается, что значения, полученные для времени жизни квазичастиц в рамках G_0W_0 приближения, как правило, больше наблюдаемых значений времени релаксации. Как демонстрируется в третьей главе диссертации, учет вершинных поправок к собственной энергии, найденной в рамках G_0W_0 приближения, позволяет заметно уменьшить разницу между теоретическими и экспериментальными значениями τ . Однако, согласно рис. 3, энергетическая зависимость отношения усредненных времен жизни, вычисленных для Mo и Rh, достаточно хорошо воспроизводит поведение этого отношения, наблюдаемое в эксперименте. Поэтому утверждается, что указываемые на уровне G_0W_0 рассмотрения тенденции в изменении времени жизни квазичастиц при движении в пределах одной группы и вдоль d -переходных периодов носят фундаментальный характер, и при выходе за пределы этого приближения возможная модификация значений τ не приведет к значительной трансформации их отношений.

Отмечается также то, что в количественном отношении изменения в $\tau(\omega)$ при движении вдоль $4d$ периода и вдоль $5d$ периода во многом отличаются, несмотря на общую тенденцию в изменении формы ПЭС (см. рис. 3). Кроме этого близость отношений τ^{Mo}/τ^{Rh} и τ^W/τ^{Ta} при $(E - E_F) < 0$ говорит о том, что в случае дырок, например, переход от Ta к W (ОЦК \rightarrow ОЦК) дает практически такой же эффект как переход от Mo к Rh (ОЦК \rightarrow ГЦК). Таким образом, за ПЭС следует признать важную, но не определяющую роль в формировании вида зависимости $\tau(E - E_F)$. Другими словами, описание времени жизни

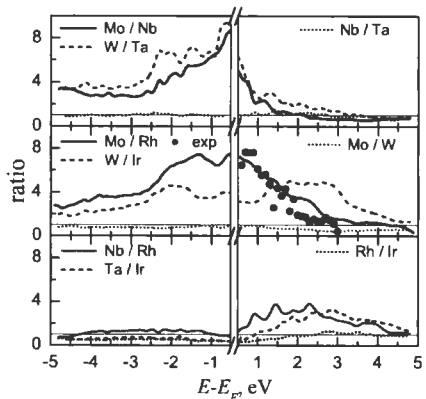


Рис. 3. Отношения усредненных времен жизни для указанных металлов. Экспериментальные данные 2Ф-ФЭС-ВР для Mo и Rh взяты из работы [A4].

квазичастиц не исчерпывается лишь анализом плотности электронных d -состояний, локализованных в области уровня Ферми. В качестве дополнительного фактора указываются экранирующие свойства изучаемых систем. При этом показано, что для рассмотренных d -переходных металлов уже на уровне экранировки электронного взаимодействия лишь локализованными d -электронами удастся воспроизвести те тенденции в изменении поведения времени жизни при переходе от одного металла к другому, которые наблюдаются в зависимостях $\tau(\omega)$, полученных в расчетах с полностью экранированным взаимодействием.

Подводя итог проведенного в первом разделе второй главы исследования отмечается, что в силу учета реалистичной зонной структуры переходных металлов все рассмотренные материалы характеризуются энергетической зависимостью времени жизни возбуждений отличной от получаемой в подходе свободных электронов [18]. Кроме этого, поведение τ как функции энергии возбуждения во многом индивидуально для каждого из рассматриваемых d -металлов даже в том случае, когда плотности электронных состояний этих металлов близки по форме. Явно наблюдаемой коррелирующей между ПЭС и временами жизни квазичастиц является резкое увеличение значений τ при заметном уменьшении плотности состояний в области уровня Ферми. Этот эффект, обратный наблюдаемому в [18], обнаруживается как в случае небольшого изменения заполнения зон, меняющихся слабо в силу сохранения кристаллической структуры (переходы от Nb к Mo и от Ta к W), так и в случае существенного изменения и заполнения зон, и самой зонной структуры (переходы от Mo к Rh и от W к Ir).

Во втором разделе главы исследуется спиновая асимметрия времени жизни, скорости и средней длины свободного пробега квазичастиц в ферромагнитных металлах (Fe, Co и Ni) и их соединениях (Co_3Fe и Ni_3Fe с D0_3 и L1_2 структурой соответственно). При этом, для демонстрации возможного эффекта смены стехиометрии и структуры рассмотрены также CoFe со структурой B2 и NiFe со структурой L1_0 . Отмечается, что указанным системам присуще большое различие во временах жизни электронных возбуждений со спином вверх и спином вниз, которое обуславливает появление так называемого эффекта спинового фильтра, наблюдаемого в спин-зависимом транспорте электронов в ферромагнитных металлах [19]. Исходя из анализа, проведенного в первом разделе главы, это различие может быть объяснено уже на уровне сравнения ПЭС с разным направлением спина, то есть на основе представлений о фазовом пространстве.

При рассмотрении системы Co-Fe (см. верхнюю часть рис. 4) обращается внимание на то, что в целом в соединениях этой системы времена жизни электронов со спином вверх больше, чем в чистых металлах, формирующих соединения. Электроны со спином вниз в ОЦК железе имеют самое большое время жизни на всем энергетическом интервале. В области дырочных возбуждений наибольшее время наблюдается у B2-CoFe в обеих спиновых подсистемах. Наблюдаемая спиновая асимметрия квазичастичных свойств представляется отношением $\tau_{\uparrow}/\tau_{\downarrow}$ (см. нижнюю часть рис. 4). В B2-CoFe в области уровня Ферми ($E - E_F$ от 0 до ~ 0.7 eV) это отношение достигает восьми, тогда как в ОЦК Co и $\text{D0}_3\text{-Co}_3\text{Fe}$, обладающих большей спиновой поляризацией, чем CoFe, оно превышает 12. Для ОЦК железа отмечается наличие практически неизменного обратного отношения $\tau_{\downarrow}/\tau_{\uparrow}$ в области дырочных возбуждений (см. вставку на рис. 4). В отличие от ОЦК железа и ОЦК кобальта рассматриваемые соединения характеризуются отношением $\tau_{\uparrow}/\tau_{\downarrow}$, которое на широком интервале энергий возбуждения (от ~ 1 до 5 eV) имеет достаточно большое значение и слабо зависит от энергии. Для электронов с энергией меньше, чем ~ 1 eV, $\text{D0}_3\text{-Co}_3\text{Fe}$ обладает наибольшим отношением $\tau_{\uparrow}/\tau_{\downarrow}$. Важным представляется тот факт, что для соединений отношение времен жизни квазичастиц с разным направлением спина не может быть пред-

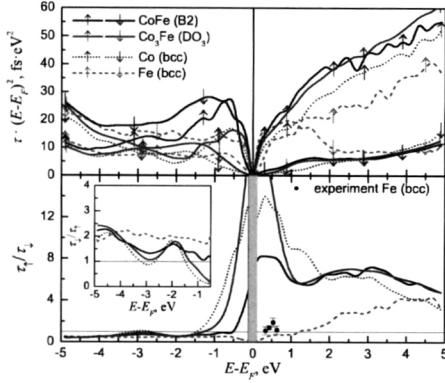


Рис. 4. Умноженное на квадрат энергии возбуждения $E - E_F$ и усредненное по \mathbf{k} время жизни τ_{σ} квазичастиц с разным направлением спина (вверху) и отношение усредненных времен жизни $\tau_{\uparrow}/\tau_{\downarrow}$ (внизу) для ОЦК Fe, ОЦК Co, B2-CoFe и D0₃-Co₃Fe. На вставке – отношение $\tau_{\downarrow}/\tau_{\uparrow}$ для дырочных возбуждений. Экспериментальные данные 2Ф ФЭСВР для ОЦК железа взяты из [20].

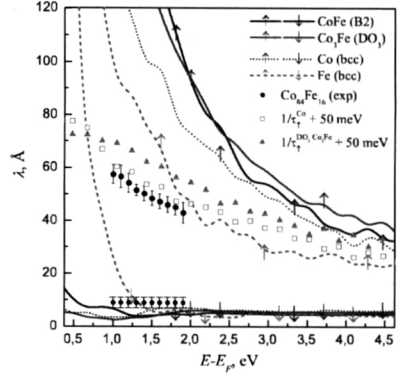


Рис. 5. Усредненная по \mathbf{k} средняя длина свободного пробега λ_{σ}^{e-e} . Экспериментальные данные по длине затухания для электронов с разным направлением спина в Co₈₄Fe₁₆ взяты из [19].

ставлено как средневзвешенное, полученное на основе результатов расчета времени жизни квазичастиц в ОЦК Fe и Co.

При рассмотрении средней длины свободного пробега квазичастиц прежде всего отмечается, что значительная разница между скоростями электронов с разным направлением спина усиливает указанное выше различие между временами жизни электронов с разным направлением спина. Как следствие, делается вывод, что для рассматриваемых ферромагнетиков G_0W_0 приближение предсказывает сильный эффект спинового фильтра, выраженный в многократном превышении длины свободного пробега электронов со спином вверх по отношению к длине свободного пробега электронов со спином вниз. При этом отмечается, что на эксперименте такого превышения не наблюдается, что видно из представленных на рис. 5 результатов по изучению спин-зависимого электронного транспорта в пленках Co₈₄Fe₁₆ на GaAs(001) [19].

Для анализа наблюдаемого несоответствия теоретических и экспериментальных данных отмечается, что G_0W_0 приближение не учитывает каналы затухания квазичастиц, связанные с флуктуациями спиновой плотности. Учет последних приводит к сокращению времени жизни, а, следовательно, и к уменьшению длины свободного пробега. Предполагается, что наиболее чувствительна в этом смысле λ_{σ}^{e-e} . Далее исследуемая величина представляется в виде $1/\lambda_{\sigma}^{exp} = 1/\lambda_{\sigma}^{e-e} + 1/\lambda_{\sigma}^{extra}$, где кроме неупругого электрон-электронного рассеяния ($1/\lambda_{\sigma}^{e-e}$) присутствуют вклады от квазиупругого рассеяния на фононах и спиновых волнах, а также упругого рассеяния электронов на дефектах и примесях (представлены одним слагаемым $1/\lambda_{\sigma}^{extra}$). В качестве демонстрации эффекта учета электрон-фононного вклада на рис. 5 для ОЦК Co и D0₃-Co₃Fe приводится результат сложения $1/\lambda_{\sigma}^{e-e}$ и $1/\lambda_{\sigma}^{extra} = \Gamma_{\uparrow}/v_{\uparrow} \pm \Gamma_{\uparrow} = 50$ meV, что по порядку величины близко к наблюдаемому в различных металлах уширению спектральных линий, связанному с рассеянием на фононах. Отмечается, что в данном случае разница между экспериментальными и теоре-

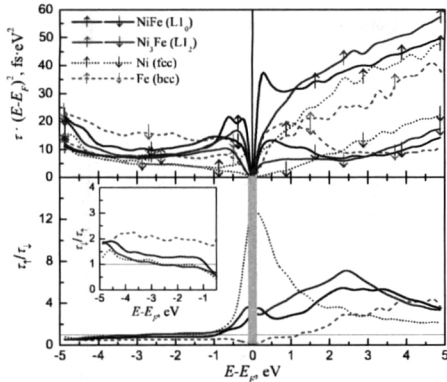


Рис. 6. Умноженное на квадрат энергии возбуждения $E - E_F$ и усредненное по k время жизни τ_σ квазичастиц с разным направлением спина (вверху) и отношение усредненных времен жизни $\tau_\uparrow/\tau_\downarrow$ (внизу) для ОЦК Fe, ГЦК Ni, $L1_0$ -NiFe и $L1_2$ -Ni₃Fe. На вставке – отношение $\tau_\downarrow/\tau_\uparrow$ для дырочных возбуждений.

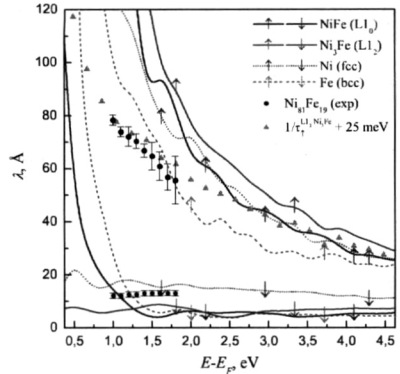


Рис. 7. Усредненная по k средняя длина свободного пробега λ_{σ}^{e-e} . Экспериментальные данные по длине затухания для электронов с разным направлением спина в Ni₈₁Fe₁₉ взяты из [19].

тическими данными резко сокращается. Более того, хорошо воспроизводится поведение длины затухания как функции энергии возбуждения.

Все результаты, полученные для системы Ni-Fe представлены на рис. 6. В отношении полученных результатов указывается, что подобно системе Co-Fe время жизни электронов со спином вверх в соединениях больше, чем в ОЦК железе и ГЦК никеле. Что касается времени жизни электронов со спином вниз в соединениях, то отмечается, что оно представляет собой нечто среднее между железом и никелем. При этом, благодаря доминирующему вкладу «железных» состояний в ПЭС $L1_0$ -NiFe выше уровня Ферми, τ_\downarrow в этом соединении ближе к таковому в Fe. Высокое содержание никеля в $L1_2$ -Ni₃Fe приводит к τ_\downarrow , приближающемуся к ГЦК никелю. При анализе спиновой асимметрии (нижняя часть рис. 6) обращается внимание на то, что наибольшее $\tau_\uparrow/\tau_\downarrow$ в окрестности уровня Ферми соответствует ГЦК никелю, демонстрирующему большую спиновую поляризацию, чем ОЦК Fe и соединения системы Ni-Fe. Что касается последних, то в среднем для электронов $L1_2$ -Ni₃Fe демонстрирует отношение около 5 против 4 в случае $L1_0$ -NiFe. Представленные на вставке кривые отражают ситуацию с временем жизни дырок, которая может рассматриваться как постепенный переход от ОЦК железа к ГЦК никелю.

На рис. 7 изображены результаты расчета λ_{σ}^{e-e} для электронов как функции энергии возбуждения в сравнении с экспериментальными данными по длине затухания, взятыми из [19], где исследовался спин-зависимый транспорт электронов в пленках Ni₈₁Fe₁₉ на поверхности GaAs(001). В связи с представленными результатами отмечается, что среди рассмотренных материалов системы Ni-Fe соединение $L1_2$ -Ni₃Fe характеризуется наибольшей длиной пробега электронов со спином вверх. Говорится, что в ГЦК Ni и $L1_2$ -Ni₃Fe $\lambda_{\downarrow}^{e-e}$ практически не зависит от энергии. Такое поведение $\lambda_{\downarrow}^{e-e}$ согласуется с экспериментальными наблюдениями. Более того, полученные значения близки к экспериментальным. Однако G_0W_0 расчет завышает значения длины затухания для электронов со спином вверх.

Как и для системы Fe-Co оценена обратная величина длины затухания электронов со спином вверх в $L1_2\text{-Ni}_3\text{Fe}$ как $1/\lambda_{\uparrow}^{e-e} + \Gamma_{\uparrow}/v_{\uparrow}$, но с $\Gamma_{\uparrow} = 25$ meV. Полученные результаты представлены на рис. 7. Отмечается, что с помощью такой добавки, имитирующей вклад электрон-фононного взаимодействия, достигается хорошее согласие с экспериментом.

Третий раздел содержит выводы ко второй главе.

В третьей главе представлен разработанный метод, позволяющий выходить за пределы G_0W_0 приближения путем суммирования бесконечного ряда лестничных диаграмм разложения поляризационной функции и собственной энергии по экранированному кулоновскому взаимодействию. Проводится сравнение предлагаемого метода с существующими в литературе теоретическими подходами к описанию квазичастичных свойств в применении как к модельной системе, так и к реальным материалам. Во всей главе в формулах используется атомная система единиц, т. е. $e^2 = \hbar = m_e = 1$. Результаты третьей главы опубликованы в работах [A1, A2, A4, A7, A8].

В первом разделе главы излагается основа предлагаемого метода, основанного на вариационном решении уравнения Бете-Солпитера для двухчастичной амплитуды рассеяния в рамках локального приближения. Рассматриваются лестничные фейнмановские диаграммы в разложении [15] поляризационной функции и собственной энергии по экранированному кулоновскому взаимодействию. Предполагается, что изучаемым системам соответствует диагональная в спиновом пространстве функция Грина. Лестничное приближение для указанного интегрального уравнения на нахождение амплитуды рассеяния (T матрицы) записывается в виде:

$$T_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(1, 2|3, 4) = W(1, 2)\delta(1-3)\delta(2-4) + W(1, 2) \int d1' d2' K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(1, 2|1', 2') T_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(1', 2'|3, 4), \quad (1)$$

где σ обозначает спин, α означает $e-e$ в случае многократного рассеяния между двумя электронами или двумя дырками и $e-h$ в случае многократного электрон-дырочного рассеяния. Величина $K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$ представляет собой произведение функций Грина $G_{\sigma}(1, 2)$:

$$K_{\sigma\sigma'}^{e-e}(1, 2|1', 2') = iG_{\sigma}(1, 1')G_{\sigma'}(2, 2'), \quad K_{\sigma\sigma'}^{e-h}(1, 2|1', 2') = iG_{\sigma}(1, 1')G_{\sigma'}(2', 2).$$

Здесь использовано обозначение $1 \equiv (\mathbf{r}_1, t_1)$. Далее для упрощения изложения метода рассматривается однородная система, для которой T -матрица (1) в пространстве импульсов принимает форму

$$T_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(p_1, p_2|p_3, p_4) = (2\pi)^4 \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(p_1, p_2|p_3, p_4) \delta(p_1 \pm p_2 - (p_3 \pm p_4)).$$

Здесь и ниже 4-вектор p используется как короткая запись для (\mathbf{p}, ω_p) , верхний знак соответствует $e-e$ случаю, тогда как нижний знак - $e-h$ случаю, а

$$\Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(p_1, p_2|p_3, p_4) = W(\pm p_1 \mp p_3) + \frac{i}{(2\pi)^4} \int dk W(k) G_{\sigma}(p_1 \mp k) G_{\sigma'}(p_2 + k) \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(p_1 \mp k, p_2 + k|p_3, p_4). \quad (2)$$

После введения импульса центра масс и относительных импульсов $Q = p_1 \pm p_2 = p_3 \pm p_4$, $q = (p_1 \mp p_2)/2$, $q' = (p_3 \mp p_4)/2$, уравнение (2) принимает вид:

$$\int dk \Phi_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(q, k, Q) \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(k, q', Q) = W(\pm q \mp q'), \quad (3)$$

где $\Phi_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(q, k, Q) = \delta(q - k) - W(\pm q \mp k)\kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(\pm \frac{1}{2}Q \mp k)$, а $\kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(k) = \frac{i}{(2\pi)^4}G_{\sigma}(Q \mp k)G_{\sigma'}(k)$. Для решения уравнения (3) вариационным методом строится функционал (трех независимых функций, G , W and Γ)

$$F^{\alpha}[G, W, \Gamma] = \sum_{\sigma\sigma'} \int dk dq' dQ \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(k, q', Q) \kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(\pm \frac{1}{2}Q \mp k) \times \left\{ dp \Phi_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(k, p, Q) \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(p, q', Q) - 2W(\pm k \mp q') \kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(\pm \frac{1}{2}Q \mp q') \right\}, \quad (4)$$

уравнение Эйлера для которого, $\delta F^{\alpha}[G, W, \Gamma]/\delta \Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(q, q', Q) = 0$, эквивалентно уравнению (3). Пробное решение выбирается в духе локального приближения [21] как $\Gamma_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(q, q', Q) = \tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q)$. Это приводит к

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) = \tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) \left[1 - \tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) \right]^{-1}, \quad (5)$$

где $\tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) = [K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q)]^{-1} M_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) [K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q)]^{-1}$, $M_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) = \int dq dp \kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(q) W(q - p) \kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(p)$, а $K_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q) = \int dp \kappa_{\sigma\sigma', Q}^{\alpha}(p)$. Таким образом получена T -матрица, которая является функцией лишь импульса центра масс Q . Это означает, что вместо параметра Хаббарда U подходов, основанных на модельных гамильтонианах, присутствует локальное взаимодействие, зависящее как от импульса, так и от энергии $\tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}(Q)$.

Показано, что найденное вариационное решение позволяет учесть многократное электрон-дырочное рассеяние при вычислении поляризационной функции с помощью соотношения $P(p) = -\sum_{\sigma} K_{\sigma\sigma}^{e-h}(p) [1 - \tilde{W}_{\sigma\sigma}^{e-h}(p) K_{\sigma\sigma}^{e-h}(p)]^{-1}$. Для парамагнитного состояния это приводит к $P(p) = P^0(p) [1 + v_c(q) \mathcal{G}_X(p) P^0(p)]^{-1}$, где фактор $\mathcal{G}_X(p) = \tilde{W}^{e-h}(p)/2v_c(p)$. Такая запись позволила сопоставить полученное локальное взаимодействие с обменной частью спин-симметричного многочастичного фактора локального поля, учитывающего эффекты обменно-корреляционной дырки в процессе экранирования. В представленном соотношении v_c - кулоновское взаимодействие, а $P^0(p) = -\sum_{\sigma} K_{\sigma\sigma}^{e-h}(p)$ - поляризационная функция ПХФ.

При рассмотрении вкладов лестничных диаграмм в квазичастичную собственную энергию для последней предложена новая форма, включающая T -матрицу и составляющая основу развитого метода. Анализировались два вклада: прямой и обменный. Прямой вклад

$$\Sigma_{\sigma}^d(p) = -\frac{i}{(2\pi)^4} \sum_{\sigma'} \int dk G_{\sigma'}(k) \left\{ \Gamma_{\sigma\sigma'}^{e-e}\left(\frac{p-k}{2}, \frac{p-k}{2}, p+k\right) + \Gamma_{\sigma\sigma'}^{e-h}\left(\frac{p+k}{2}, \frac{p+k}{2}, p-k\right) \right\} \quad (6)$$

имеет $e-e$ и $e-h$ слагаемые, тогда как обменный вклад

$$\Sigma_{\sigma}^x(p) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int dk G_{\sigma}(k) \Gamma_{\sigma\sigma}^{e-e}\left(\frac{k-p}{2}, \frac{p-k}{2}, p+k\right) \quad (7)$$

определяется лишь спин-диагональной частью T^{e-e} матрицы. Отмечается, что с T -матрицей (5) обменный вклад равен с обратным знаком спин-диагональной части $e-e$ слагаемого в прямом вкладе. В результате, как и в подходах с модельными гамильтонианами, эти вклады компенсируют друг друга.

Для того, чтобы избежать проблемы двойного учета диаграмм низшего порядка, а также сохранения всех достоинств G_0W_0 приближения, выделяется обменный вклад первого порядка (собственная энергия Σ_{σ}^{GW}) в отдельное слагаемое, а полученные T -матрицы берутся, начиная со второго (или третьего в $e-h$ случае) порядка по $\tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{\alpha}$:

$$T_{\sigma\sigma'}^{e-e}(k) = \tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{e-e}(k) K_{\sigma\sigma'}^{e-e}(k) \tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{e-e}(k), \quad T_{\sigma\sigma'}^{e-h}(k) = \tilde{\Gamma}_{\sigma\sigma'}^{e-h}(k) [K_{\sigma\sigma'}^{e-h}(k) \tilde{W}_{\sigma\sigma'}^{e-h}(k)]^2.$$

Таким образом, в дополнение к Σ_{σ}^{GW} собственной энергии получается вклад T -матрицы в следующем виде:

$$\Sigma_{\sigma}^T(p) = -\frac{i}{(2\pi)^4} \int dk \{ G_{-\sigma}(k) T_{\sigma-\sigma}^{e-e}(p+k) + \sum_{\sigma'} G_{\sigma'}(k) T_{\sigma-\sigma'}^{e-h}(p-k) \}. \quad (8)$$

Теперь есть только одно слагаемое $\Sigma'_{\sigma}(p) = -\frac{i}{(2\pi)^4} \int dk G_{-\sigma}(k-p) \widetilde{W}_{\sigma-\sigma}^{e-e}(k) K_{\sigma-\sigma}^{e-e}(k) \widetilde{W}_{\sigma-\sigma}^{e-e}(k)$, которое должно быть исключено из вклада T -матрицы (8). В результате собственно-энергетическая часть записывается как $\Sigma_{\sigma} = \Sigma_{\sigma}^{GW} + \Sigma_{\sigma}^T - \Sigma'_{\sigma}$. Далее во всей работе рассматривается лишь вклад многократного электрон-дырочного рассеяния.

Для получения аналитического выражения для локального взаимодействия $\widetilde{W}_{\sigma\sigma}^{e-h}$ рассмотрен предел малых передач энергии импульса. При этом предполагалось, что предельная форма локального взаимодействия может служить хорошим приближением, так как в основном изучаются элементарные возбуждения с энергией в небольшой окрестности уровня Ферми, где квазичастицы хорошо определены. В результате для трехмерного электронного газа в парамагнитном состоянии при использовании приближения Томаса-Ферми для экранированного взаимодействия получено соотношение $\widetilde{W}^{e-h} = A_{XF}^{TF}(r_s) 8\pi/k_F^2$, где параметр r_s , электронной плотности n определяется как $\frac{4\pi}{3}(a_0 r_s)^3 = 1/n$, a_0 - радиус Бора, $\alpha = (\frac{4}{9\pi})^{1/3}$, а $\alpha r_s k_F = 1$. В указанном соотношении, определяющем локальное взаимодействие, коэффициент $A_{XF}^{TF}(r_s) = \ln(1 + \pi[\alpha r_s]^{-1})/8$. В работе проводится сравнение этого коэффициента с аналогичным коэффициентом, появляющимся в точном длинноволновом пределе для многочастичного фактора локального поля. Указывается, что полученная форма хорошо согласуется с другими теоретическими результатами по обменной части фактора локального поля в интервале значений r_s , соответствующих металлическим плотностям (Al, Li, Na, K, Cs).

Во втором разделе третьей главы рассмотрено влияние включения полученного вклада T -матрицы в качестве дополнительного слагаемого к $G_0 W_0$ собственной энергии на свойства квазичастиц. При этом использовалась найденная предельная форма для локального взаимодействия в случае малых передач энергии-импульса. Рассмотрение проводится в рамках модели «желе». Интервал значений параметра плотности (r_s , от 2 до 56) выбран таким образом, чтобы захватить область металлических значений, а также окрестность $r_s \sim 48$, для которой предсказана в работах [22] расходимость в эффективной массе. Отмечается, что численные результаты получены с помощью разработанных автором программ, реализующих как $G_0 W_0$ приближение, так и предложенный в работе метод учета многократного электрон-дырочного рассеяния в рамках модели «желе».

Для получения представления о величине и поведении вклада T -матрицы в сравнении с $G_0 W_0$ слагаемым, проведены расчеты, результаты которых представлены на рис. 8 и 9. Рассматривалась мнимая и вещественная часть собственной энергии на массовой поверхности (обозначается этот случай как «on-shell»), то есть когда $\omega = \epsilon(k)$. Мнимая часть в этом случае задает ширину спектральной функции или скорость затухания квазичастиц, а вещественная часть определяет вклад многочастичных эффектов в дисперсию зон.

Отмечается, что $\text{Im}\Sigma^{GW}$ как функция r_s демонстрирует относительно небольшие изменения для $0.0k_F \leq |k| \lesssim 1.5k_F$ и уже при $r_s \sim 24$ достигает некоторого «насыщения», после чего свойства $e-h$ канала затухания остаются практически неизменными в указанном интервале k . Для $|k| > 1.5k_F$, особенно в области эмиссии плазмона, скорость затухания квазичастиц показывает непрерывный рост с увеличением r_s . Из-за такого поведения $\text{Im}\Sigma^{GW}$ вещественная часть $G_0 W_0$ слагаемого монотонно уменьшается как функция r_s . Относительно вклада T -матрицы отмечается, то после $r_s \sim 40$ изменения в мнимой и вещественной частях становятся незначительными для любого рассматриваемого k . Тем не

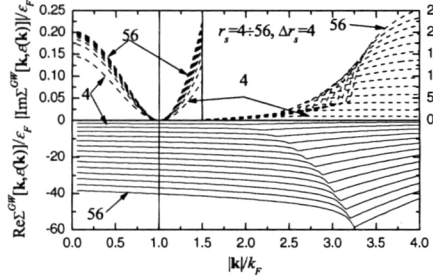


Рис. 8. Вещественная и мнимая части Σ^{GW} на массовой поверхности в зависимости от $|k|/k_F$ для r_s от 4 до 56.

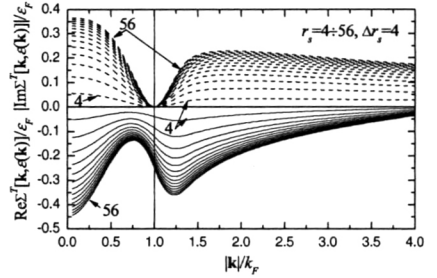


Рис. 9. Вещественная и мнимая части Σ^T на массовой поверхности в зависимости от $|k|/k_F$ для r_s от 4 до 56.

менее, с увеличением r_s вклад T -матрицы в мнимую часть собственной энергии быстро нарастает и приводит к заметному понижению времени жизни квазичастиц особенно в окрестности k_F . Вещественная часть вклада Σ^T приводит к небольшой модификации дисперсии энергии квазичастиц, уменьшая сужение зоны, получаемое в G_0W_0 приближении.

Далее в разделе анализируется вклад вещественной части Σ^T в ренормализационный фактор на поверхности Ферми Z_F (спектральный вес) и эффективную массу квазичастиц m^*/m . Фактор Z_F находился по формуле $Z_F = \left[1 - \partial\Sigma(k, \omega)/\partial\omega|_{\omega=0, k=k_F}\right]^{-1}$. Эффективная масса вычислялась как в приближении массовой поверхности $m^*(k_F) = k_F [dE_k/dk|_{k=k_F}]^{-1}$, которое обоснованно лишь при малых значениях r_s (обозначен этот случай как “on-shell”), так и в формально точной схеме Дайсона (обозначен этот случай как “off-shell”), где имеем $m^*/m = Z_F^{-1} \left[1 + (m/k_F) \partial\Sigma(k, \omega)/\partial k|_{\omega=0, k=k_F}\right]^{-1}$. Обсуждаемые в разделе результаты представлены на рис. 10 в сравнении с доступными в литературе данными. Прежде всего отмечается, что, включение T -матрицы уменьшает ренормализационный фактор Z_F . Тем самым вклад T -матрицы смещает кривую Z_F по направлению к GZ (Gori-Giorgi–Ziesche) параметризации [23]. Эта параметризация хорошо согласуется с расчетами, проведенными с использованием метода разложения по эффективному потенциалу, который в отличие от разложения Хедина [15] формулируется в терминах статического экранированного взаимодействия $W(\mathbf{q}, 0)$. GZ параметризация также согласована с данными, полученными квантовым методом Монте-Карло в [24] для функции распределения. Тот факт, что ренормализационный фактор Z_F , найденный квантовым методом Монте-Карло в [24] (обозначено как “ОВ” на рисунке) заметно больше, чем дает параметризация, объясняется различием в процедурах нахождения скачка в функции распределения при k_F . В случае параметризации величину скачка можно определить с большей точностью.

Относительно результатов самосогласованных схем работ [27] (“НВ”), [25] (“НП”) и [26] (“РС”) отмечается, что повышение ренормализационного фактора по сравнению с полученными значениями фактора Z_F^{GW} можно объяснить в рамках детального анализа, приведенного в [27], где сделан вывод о том, что G_0W_0 дает более реалистичное описание квазичастичных свойств, чем полностью самосогласованное GW приближение. Процедура самосогласования приводит к сильному подавлению плазменных пиков в мнимой части Σ^{GW} . Посредством преобразования Гильберта это имеет свои последствия для вещественной части в виде существенного сглаживания соответствующей пиковой структуры. Как

следствие. производная по энергии от вещественной части, которая отрицательна, становится меньше по модулю, что, в свою очередь, ведет к повышению ренормализационного фактора.

Что касается эффективной массы, то в работе уделяется внимание сильному различию "on-shell" и "off-shell" результатов. Так, например, "on-shell" G_0W_0 эффективная масса демонстрирует расходимость при $r_s \sim 50$ (в [22] при $r_s \sim 48$). Включение T -матрицы приводит к значительному повышению "on-shell" G_0W_0 эффективной массы и смещает расходимость к точке $r_s \sim 33$. В случае "off-shell" эффективной массы влияние вклада T -матрицы на m/m^* согласовано с его влиянием на ренормализационный фактор. В этом случае квазичастичная масса демонстрирует относительно слабую зависимость от r_s , без какой-либо расходимости вплоть до самых больших r_s , рассматриваемых в работе.

Проводя сравнение полученной зависимости $m/m^*(r_s)$ с таковой, найденной в [26] ("RS") и [25] ("NI"), обнаруживается, что самосогласованные схемы предсказывают монотонное повышение обратной эффективной массы как функции r_s . Важно, что такое повышение подразумевает уширение зоны при металлических плотностях, что противоречит экспериментальным данным. Таким образом, вместе со слегка повышенным Z_F в сравнении с G_0W_0 приближением [см. вставку на рис. 10(a)] эти схемы дают эффективную массу, которая меньше, чем в не взаимодействующей системе, тогда как G_0W_0 дает обратное. Это означает, что в "RS" и "NI" случаях производная по импульсу от собственной энергии больше, чем она же, полученная в рамках G_0W_0 приближения. Делается предположение, что это обусловлено большим вкладом слагаемого Хартри-Фока, который без корреляционного слагаемого приводит, как известно, к нулевой эффективной массе на поверхности Ферми. Этот вклад не может быть компенсирован корреляционной частью в полной мере, как это происходит в не самосогласованном G_0W_0 приближении (см. [27]). В результате это приводит к повышению m/m^* .

В этом разделе проведено также детальное сравнение предложенного метода с известными в литературе подходами к описанию свойств квазичастиц в применении к алюминию. Основное внимание уделялось времени жизни возбужденных электронов. Выбор алюми-

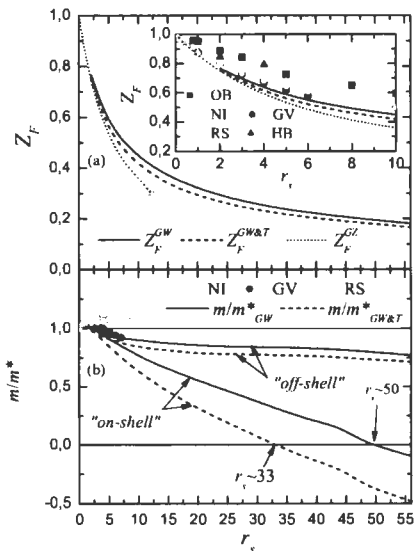


Рис. 10. (a) Ренормализационный фактор Z_F при фермиевском волновом векторе, полученный в рамках G_0W_0 приближения (обозначен как $Z_F^{G_0W_0}$; сплошная линия) и с дополнительным вкладом T -матрицы ($Z_F^{G_0W_0+T}$; штриховая линия), как функция r_s . Пунктирная линия соответствует GZ параметризации [23], которая законна в интервале плотностей $r_s \lesssim 12$. Вставка показывает полученные результаты в сравнении с другими расчетами, взятыми из литературы. (b) Обратная "on-shell" и "off-shell" эффективная масса m/m^* . Символы "OB", "NI", "GV", "RS" и "HB" обозначают соответствующие значения, взятые из [24], [25], [4], [26] и [27].

ния обусловлен тем фактом, что алюминий обладает зонной структурой почти свободных электронов, и поэтому многие свойства этого простого металла могут быть хорошо описаны в рамках модели «желе». Поэтому прежде всего для проведения такого сравнения в рамках указанной модели были разработаны программы, реализующие также G_0W_0 приближение [28] и обобщенное G_0W_0 приближение [4], учитывающее флуктуации как зарядовой, так и спиновой плотности, с использованием различных аналитических форм для многочастичных факторов локального поля. Обнаружено, что предложенный в работе метод дает результаты, которые очень близки к таковым, полученным в рамках обобщенного G_0W_0 приближения, но в отличие от последнего не содержит величин, определяемых вне метода, и реализуем на практике для проведения первопринципных расчетов.

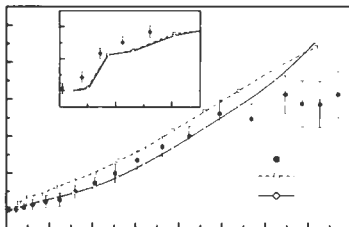


Рис. 11. Закон дисперсии плазмона в калии в направлении Γ -N зоны Бриллюэна. Вставка: ширина линии плазмона как функция вектора q , отнесенная к ее значению в длинноволновом пределе. Точки — экспериментальные данные из [29]; штриховая линия с квадратами — ПХФ-расчет; сплошная линия с ромбами — расчет со статическим самосогласованным ФЛП G_X .

результатов расчета электрон-фононного вклада, взятых из [A8], привело к времени жизни, близкому к тому, что дает экспериментальное исследование.

В третьем разделе главы рассматривается то, к каким результатам приводит использование предложенного метода в рамках первопринципных расчетов в применении к металлам, которые демонстрируют свойства, значительно отличающиеся от тех, которые могут быть описаны в рамках модели свободных электронов. В первую очередь исследуется влияние многократного электрон-дырочного рассеяния на экранирующие свойства на примере калия. Обосновывается выбор щелочного металла в качестве тестовой системы. Описывается процедура вычисления локального взаимодействия в рамках *ab initio* расчетов с учетом результатов, полученных во втором разделе.

Результаты по закону дисперсии $\omega_p(q)$ и ширине линии $\Delta E_{1/2}$ плазмона, обсуждаемые в разделе, представлены на рис. 11. На рисунке отображены теоретические кривые, полученные как в рамках ПХФ, так и с учетом вклада лестничных диаграмм, в сравнении с экспериментальными данными. Отмечается удовлетворительное в рамках ПХФ и детальное с учетом многократного электрон-дырочного рассеяния согласие с экспериментальными данными по дисперсии плазменных колебаний в калии для $q^2 < \sim 0.55 \text{ \AA}^{-2}$. Однако для больших q наблюдается значительное расхождение теоретических и экспери-

ментальных данных, что связано с неоднозначностью определения плазмонного пика в области $q > q_c \sim \omega_p/v_F$, где плазмон находится в континууме электроп-дырочных возбуждений и подвержен механизму затухания Ландау [29].

При анализе полученных данных по ширине линии плазмона $\Delta E_{1/2}$ отмечается, что, во-первых, найденная зависимость ширины линии от волнового вектора воспроизводит экспериментально наблюдаемое поведение $\Delta E_{1/2}$ с ростом q . Во-вторых, отсутствует значимое влияние фактора локального поля на ширину линии плазмона в катии.

Далее в разделе представлены результаты *ab initio* расчетов времени жизни квазичастиц в молибдене и родии, полученные в рамках предложенного метода (см. рис. 12). Обосновывается выбор металлов. Указывается то, каким образом на основе результатов исследований, проведенных в предыдущем разделе, моделируется локальное взаимодействие. Отмечается, что включение T -матрицы при расчете времени жизни заметно улучшает согласие между теорией и экспериментом. Подчеркивается то, что представленное на вставке рис. 12 отношение времени жизни возбужденных электронов, полученных в предложенном методе, хорошо согласуется с экспериментальными значениями этого отношения. С учетом результатов, полученных в первом разделе второй главы это подтверждает предположение о применимости G_0W_0 приближения к выявлению фундаментальных закономерностей в изменении поведения времени жизни как функции энергии возбуждения при переходе от одного d -металла к другому.

Четвертый раздел содержит выводы к третьей главе.

В четвертой главе рассматриваются двумерные электронные системы, в которых наиболее ярко проявляет себя спин-орбитальное взаимодействие (СОВ), возникающее как из-за инверсионной асимметрии потенциала, ограничивающего электронную систему в направлении, перпендикулярном плоскости залегания системы (вклад Раппы), так и из-за объемной швейершонной асимметрии, которая присутствует в полупроводниковых гетероструктурах, основанных на материалах со структурой цинковой обманки (вклад Дресельхауза). Излагаются результаты исследования влияния спин-орбитального взаимодействия на ширину спектральной функции квазичастиц в таких системах, опубликованные в работах [A9, A10, A12, A13, A15]. Обосновывается актуальность таких исследований, подчеркивается их новизна.

В первом разделе главы прежде всего получены соотношения для собственно-энергетической части, которые позволяют в рамках развивающейся многочастичной теории возмущений для систем со спин-зависимым взаимодействием [16] в G_0W_0 приближении вычислять ширину спектральной функции (или обратное время жизни) квазичастиц в рассматриваемых двумерных системах. Одночастичная часть гамильтониана записывает-

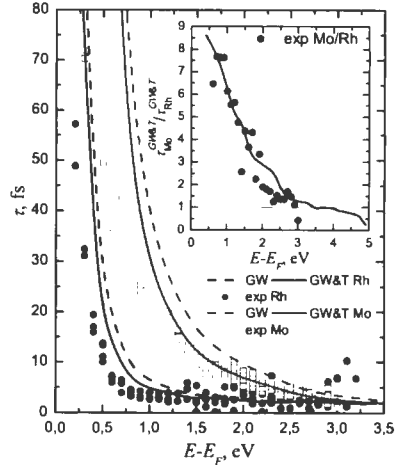


Рис. 12. Вычисленные усредненные времена жизни электронов τ и экспериментальное время релаксации в поликристаллических Rh и Mo. Вставка: отношение найденных времён жизни электронов в Mo и Rh. Экспериментальные данные 2Φ -ФЭС-ВР для Mo и Rh взяты из работы [A4].

ся как $H = H_0 + H_{SO}$, где $H_0 = k^2/2m^*$, а вклад спин-орбитального взаимодействия

$$H_{SO} = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y). \quad (9)$$

Здесь $k_{x,y}$ представляют собой компоненты вектора \mathbf{k} вдоль кубических осей кристалла [100] и [010], соответственно, $\sigma_{x,y}$ – матрицы Паули, m^* – эффективная масса. α и β – параметры, определяющие величину вкладов СОВ Раппы и Дрессельхауза. Вклад последнего записан в предположении, что рассматривается случай узких квантовых ям, выращенных в направлении [001]. Представленный гамильтониан диагонализуется, $H' = U_{\mathbf{k}}^\dagger H U_{\mathbf{k}}$, с помощью унитарного преобразования $U_{\mathbf{k}} = \exp[i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{\mathbf{k}})\Theta_{\mathbf{k}}/2]$, зависящего от \mathbf{k} и индуцирующего поворот оси квантования спина на угол $\Theta_{\mathbf{k}}$ вокруг оси $\mathbf{n}_{\mathbf{k}} = -i \sin \Phi_{\mathbf{k}} + \mathbf{j} \cos \Phi_{\mathbf{k}}$. Участвующий в соотношениях угол $\Phi_{\mathbf{k}}$ связан с полярным углом $\varphi_{\mathbf{k}}$ вектора \mathbf{k} как $\tan \Phi_{\mathbf{k}} = -(\alpha \cos \varphi_{\mathbf{k}} + \beta \sin \varphi_{\mathbf{k}})/(\alpha \sin \varphi_{\mathbf{k}} + \beta \cos \varphi_{\mathbf{k}})$.

В работе рассматривается случай спиновой поляризации в плоскости (x, y) , то есть $\Theta_{\mathbf{k}} = \pi/2$. Расщепленный спин-орбитальным взаимодействием энергетический спектр имеет вид $E_{\mathbf{k}s} = \frac{k^2}{2m^*} + sk [\alpha \sin(\varphi_{\mathbf{k}} - \Phi_{\mathbf{k}}) + \beta \cos(\varphi_{\mathbf{k}} + \Phi_{\mathbf{k}})]$. Соответствующие волновые функции $\psi'_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - s$, где индекс ветви $s = \pm(\downarrow, \uparrow)$. Здесь \downarrow, \uparrow обозначают спиновые компоненты в новом спиновом базисе. В первоначальном базисе $\psi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}) = U_{\mathbf{k}} \psi'_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r})$, а ориентация спина в \mathbf{k} пространстве определяется как $\langle \psi_{\mathbf{k}s} | \boldsymbol{\sigma} | \psi_{\mathbf{k}s} \rangle = s(\cos \Phi_{\mathbf{k}}, \sin \Phi_{\mathbf{k}}, 0)$, отражая тот факт, что направление спина электрола связано с направлением его импульса.

Далее делается упрощающее допущение, что спин-орбитальное взаимодействие можно рассматривать как преимущественно одночастичное явление, учитывая его лишь в одностичной части гамильтониана. В этом случае во всех соотношениях теории [16] в двухчастичном взаимодействии учитывается только кулоновское взаимодействие $v_{\mathbf{c}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1} \epsilon_b^{-1}$, ослабленное диэлектрической константой ϵ_b среды, в которую «погружена» двумерная система. Окончательные выражения для мнимой части матричных элементов обменной энергии, определяющих при энергии $\omega = E_{\mathbf{k}s}$ ширину спектральной функции $\Gamma_s(\mathbf{k}) = 2\text{Im}(\Sigma_s(\mathbf{k}, E_{\mathbf{k}s}))$ (обратное время $\tau_s^{-1}(\mathbf{k})$, обусловленное неупругим электрон-электронным рассеянием) имеют вид

$$\text{Im}(\Sigma_s(\mathbf{k}, \omega)) = \mp \sum_{s'} \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^2} F_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^{ss'} f_{\mathbf{q}s'}^{\pm} \text{Im}W_0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, \omega - E_{\mathbf{q}s'}) \theta(\pm E_{\mathbf{q}s'} \mp \omega), \quad (10)$$

где верхний (нижний) знак соответствует $\omega < E_F$ ($\omega > E_F$), $f_{\mathbf{q}s'}^{\pm} = f_{\mathbf{k}s}$, $f_{\mathbf{q}s'}^{-} = 1 - f_{\mathbf{k}s}$, $f_{\mathbf{k}s}$ фермиевская функция распределения, $\theta(x)$ функция Хевисайда. Входящие в выражение (10) факторы $F_{\mathbf{k},\mathbf{p}}^{ss'} = [1 + ss' \mathbf{u}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{p}}]/2$ появляются из $|\langle s' | U_{\mathbf{p}}^\dagger U_{\mathbf{k}} | s \rangle|^2$ и отражают изменение спинового базиса. Экранированное взаимодействие определяется поляризационной функцией, западающая часть которой исследовалась в [30].

Далее в разделе излагаются результаты исследования ширины спектральной функции квазичастиц в двумерном электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием в различных случаях соотношения параметров СОВ Раппы и Дрессельхауза. Характеризуется этот газ параметрами, типичными для двумерного электронного газа в квантовых ямах полупроводниковых гетероструктур. Проводились указанные исследования с помощью разработанных программ, реализующих представленную выше G_0W_0 схему. Обнаруженные особенности в поведении ширины Γ_s , индуцированные СОВ в указанных системах, в целом отражены на рис. 13. На основе анализа полученных данных отмечается, что появляется зависящее от угла относительное смещение Γ_+ и Γ_- на шкале импульсов, а также некоторое сглаживание резких форм пика, обусловленное открытием канала затухания за счет эмиссии плазмона. Первое отражает тот факт, что ветви расщепленной

зоны достигают одной и той же энергии при разных k , тогда как второе возникает из расширения области затухания Ландау за счет появления переходов между ветвями. Это расширение зависит от полярного угла φ_k и ведет к ненулевой ширине плазмона, когда спектр плазмона входит в индуцированную спин-орбитальным взаимодействием область затухания.

Для того, чтобы показать влияние, оказываемое спин-орбитальным взаимодействием на поведение ширины спектральной функции квазичастиц для различных ветвей, ширина Γ_s рассматривается как функция энергии возбуждения (вставка рис. 13). Отмечается, что в данном случае различие в ширинах пренебрежимо мало практически во всей энергетической области, где затухание квазичастиц реализуется лишь за счет образования электрон-дырочных пар. Заметным различие в ширинах, зависящее от полярного угла φ_k , становится при появлении дополнительного канала затухания за счет эмиссии плазмона. Кроме этого отмечается, что при $\alpha = \beta$ двумерный электронный газ представляет собой две несвязанные спиновые компоненты, каждая из которых демонстрирует свойства, характерные для двумерного электронного газа без спин-орбитального взаимодействия. В случаях чистого Рашбы или Дрессельхауза ($\alpha \neq 0, \beta = 0$ или $\alpha = 0, \beta \neq 0$) результирующая Γ_s не проявляет различий между разными спиновыми ориентациями, которые соответствуют случаю Рашбы или Дрессельхауза.

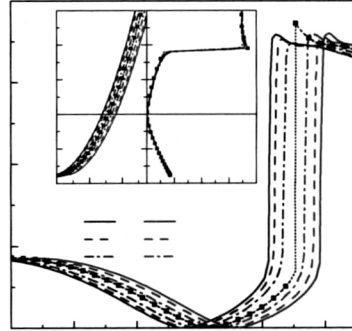


Рис. 13. Ширина Γ_s как функция k при нескольких значениях полярного угла φ_k в случае отношения $\alpha/\beta = 2.4$. Вставка: соответствующие энергетические зоны E_{ks} (слева) и та же Γ_s как функция E_{ks} , измеренной от энергии Ферми (справа). Также в качестве опорной кривой представлен случай двумерного электронного газа без спин-орбитального взаимодействия ($\alpha = \beta = 0$).

Заканчивается первый раздел моделированием поверхностного состояния на поверхности Au(111), спиновое расщепление которого, индуцированное спин-орбитальным взаимодействием, было обнаружено экспериментально с помощью фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭС-УР). Рассмотрение на основе модели однородного электронного газа показало, что в области дырочных возбуждений, как и в случае полупроводниковых квантовых ям, ширина спектральной функции практически не зависит от индекса ветви расщепленной зоны.

Во втором разделе главы представлены соотношения, модифицирующие модель повторяющихся тонких пленок с одномерным псевдопотенциалом на случай рассмотрения систем со спин-орбитальным взаимодействием. Отмечается, что использование такой модели необходимо для учета присутствия объемных состояний, которые могут быть вовлечены в процессы затухания квазичастиц в системе, сформированной электронами в спин-расщепленном поверхностном состоянии. Говорится о том, что для проведения соответствующих вычислений разработаны программные модули в дополнение к существующему программному комплексу, реализующему указанную модель.

Полученные в рамках модифицированной модели повторяющихся пленок результаты, которые анализируются в разделе, представлены на рис. 14. Рис. 14(а) демонстрирует результирующую Γ_s как функцию импульса для обеих ветвей спин-расщепленного поверх-

постного состояния, для которого параметр СОВ Раббы $\alpha_0 = 3.5118 \cdot 10^{-11}$ eV·m, а энергия в центре двумерной зоны Бриллюэна $\epsilon_0 = -474.5$ meV. Отмечается, что, как и в случае модели двумерного электронного газа, исходящие из одной точки при $k = 0$ кривые Γ_+ и Γ_- показывают практически одну и ту же зависимость от импульса со сдвигом, определяемым спиновым расщеплением. При анализе энергетической зависимости ширины Γ_s (рис. 14(b)) обнаружено, что ширина линии демонстрирует несущественную зависимость от индекса ветви. Различие варьируется в пределах $\sim 1\%$, причем наибольшее различие наблюдается в энергетическом интервале, показанном на вставке рис. 14(b).

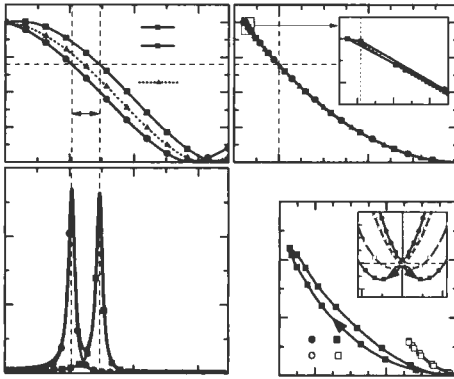


Рис. 14. (a) Зависимость ширины Γ_s от k для поверхностного состояния на поверхности Au(111). (b) Та же величина как функция энергии. Вставка: увеличение области в окрестности точки вырождения. (c) Смоделированные МДС (раздельно для каждой из ветвей и в сумме) при энергии связи 400 meV. (d) Рассчитанная энергетическая зависимость Γ_s для гипотетического случая поверхностного состояния с $E_F \approx \epsilon_0$ и параметром Раббы, характерным для поверхности Au(111) α_0 (незаполненные кружки и квадраты), а также с параметром $2\alpha_0$ (заполненные кружки и квадраты). Вставка: дисперсия энергии поверхностного состояния для этих двух случаев.

жены в первом совместном теоретическом и экспериментальном исследовании времени жизни дырок в двумерной электронной системе с СОВ Раббы [A9].

Для обнаружения ситуации, в которой спин-орбитальное взаимодействие имело бы видимый эффект, в этом разделе рассмотрим экстремальный случай гипотетического поверхностного состояния с $E_F \approx \epsilon_0$ (рис. 14(d)). В индуцированной спин-орбитальным взаимодействием области ниже точки вырождения, которая содержит только внешнюю ветвь, обнаруживается сильная зависимость от величины вклада СОВ Раббы, что указывает на возможность эффективного управления временем жизни путем изменения параметра α_0 .

В третьем разделе четвертой главы исследуется поведение ширины спектральной функции квазичастиц в двумерных электронных системах с сильным спиновым расщеплением. Отмечается, что рассмотренные до этого двумерные электронные системы ха-

Указывается на то, что описанное выше поведение Γ_s может быть исследовано экспериментально путем анализа ширины кривых распределения МДС, полученных с помощью ФЭС-УР. Обосновывается это тем, что кривая распределения МДС – это k -разрез спектральной функции при фиксированной энергии возбуждения, где в качестве ширины выступает Γ_s . Этот разрез как функция импульса будет иметь пики при k -значениях, которые соответствуют дисперсии внутренней и внешней ветви. Ширина Γ_s в окрестности этих значений k определяет k -ширину пиков. Штриховые линии, которые пересекают рис. 14(a), (b) и (c) показывают, что на k шкале ширина пиков от обоих вкладов должна быть практически одинакова, как и было предсказано в рамках модели двумерного электронного газа. В полной МДС внутренний пик может оказаться выше и шире. Подчеркивается, что именно такое поведение и наблюдается в эксперименте, результаты которого изло-

рактируются небольшим расщеплением. в то время как недавно был обнаружен целый класс перспективных для спинтроники материалов. в которых легирование тяжелыми элементами (Sb, Pl) и Bi) поверхностного слоя благородных металлов (Ag, Cu) приводит к образованию двумерной системы с гигантским спиновым расщеплением. Для предсказания того, какими свойствами будут обладать квазичастицы в таких системах, в третьем разделе проводится моделирование ситуации. соответствующей сильному спиновому расщеплению.

Для начала моделирование проведено на основе модели двумерного электронного газа. соответствующего поверхностному состоянию. Обнаружено, что в системах с сильным спиновым расщеплением в случае внешней ветви расщепленной зоны у дырок появляется дополнительный по отношению к рождению электрон-дырочных пар канал затухания за счет эмиссии плазмона. Отмечается, что вклад этого канала в ширину Γ_- в области дырочных возбуждений уменьшается как при ослаблении спин-орбитального взаимодействия Рашбы, так и при приближении уровня Ферми к точке вырождения (как в гипотетическом случае, который был рассмотрен при исследовании в рамках метода повторяющихся тонких пленок поверхности Au(111)). При значительном повышении E_F (как в случае систем со слабым спиновым расщеплением, рассмотренных в первом и втором разделе) для дырок этот канал исчезает. При анализе зависимости ширины спектральной функции как функции энергии от индекса ветви, а значит и от направления спина в выбранном направлении вектора \mathbf{k} , выяснилось, что такая зависимость проявляется в превышении единицы отношения Γ_-/Γ_+ (в среднем на 0.12 в исследуемом интервале электронных возбуждений). В связи с этим отмечается, что благодаря спиновому расщеплению, обусловленному наличием спин-орбитального взаимодействия, наблюдается заметная спиновая асимметрия ширины спектральной функции и, как следствие, длины свободного пробега возбужденных электронов.

Исходя из предположения, что рассмотренная ситуация, в принципе, может быть реализована на практике путем модификации энергии и величины спинового расщепления поверхностного состояния металлов, рассмотрена в рамках метода повторяющихся пленок поверхность Au(111) с «изменной» энергией ϵ_0 расщепленного спин-орбитальным взаимодействием поверхностного состояния. Отмечается, что в этом случае роль низкоэнергетических коллективных возбуждений будет играть акустический поверхностный плазмон. Полученные результаты, представленные на рис. 15, демонстрируют и в этом случае появление плазмонного канала затухания для дырок, что указывает на возможный путь исследования предсказанных теоретически и недавно обнаруженных экспериментально низкоэнергетических плазменных колебаний на металлических поверхностях.

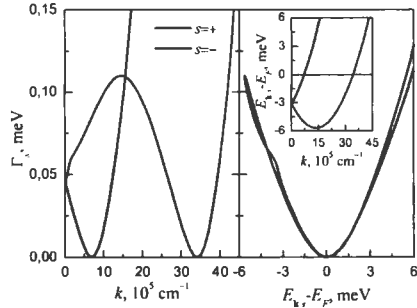


Рис. 15. Ширина Γ_s как функция модуля волнового вектора (слева) и как функция энергии возбуждения (справа) для поверхностного состояния «модифицированной» поверхности Au(111). Сплошные (пунктирные) линии соответствуют Γ_- (Γ_+). На вставке – дисперсия соответствующего поверхностного состояния, расщепленного спин-орбитальным взаимодействием Рашбы.

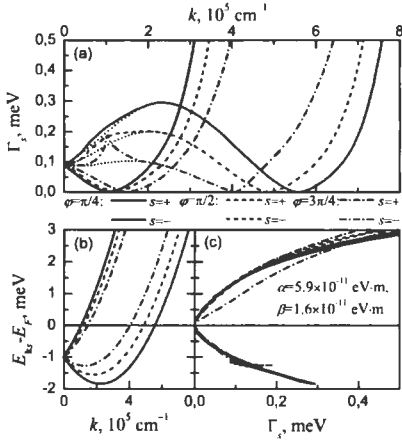


Рис. 16. (а) Ширина Γ_s как функция k при нескольких значениях полярного угла φ_k при $\alpha/\beta = 3.7$. Пунктирная линия представляет Γ_s без вклада плазмонного канала. (б) Соответствующие энергетические зоны E_{ks} . (в) То же Γ_s , но как функция энергии.

отношение Γ_-/Γ_+ достигает порядка 3 при $\sim 0.5 \text{ meV}$ и порядка 2 при $\sim 1.0 \text{ meV}$. При дальнейшем повышении энергии отношение продолжает уменьшаться. Отмечается, что в рассмотренном случае квантовой ямы спиновая асимметрия не такая большая как в ферромагнетиках, но, в отличие от последних, значения средней длины свободного пробега могут управляться внешним электрическим полем.

Четвертый раздел содержит выводы к четвертой главе.

В Заключение сформулированы основные результаты и выводы, полученные в диссертационной работе.

Основные выводы.

1. В рамках G_0W_0 приближения проведен сравнительный анализ и выявлены основные факторы влияния на зависимость времени жизни τ квазичастиц от энергии возбуждения ω в парамагнитных d -переходных металлах. Рассмотрены металлы с почти наполовину (V, Nb, Ta, Mo, W) и почти полностью заполненной (Rh, Ir) d -зоной. Обнаружено, что металлы одной и той же группы с близкими по форме плотностями электронных состояний характеризуются временами жизни одного порядка. При движении вдоль d -периода заметное снижение, а затем повышение плотности электронных состояний, локализованных в области энергии Ферми, приводит соответственно к резкому увеличению и последующему уменьшению значений времени жизни τ на всем рассматриваемом интервале значений ω . Этот эффект, обратный наблюдаемому в модели свободных электронов, обнаруживается как в случае небольшого изменения заполнения зон при слабо меняющейся зонной структуре, так и в случае существенного изменения заполнения зон и самой зонной структуры. Показано, что в целом интерпретация получаемых результатов *ab initio* расчетов не может

Затем в третьем разделе моделируется ситуация, соответствующая сильному спиновому расщеплению в квантовых ямах при наличии как взаимодействия Рашбы, так и Дрессельхауза. Полученные результаты представлены на рис. 16. Основная особенность, которая подчеркивается и которая уже была отмечена при рассмотрении случая чистого Рашбы, — это то, что для дырок ширина Γ_- как функция импульса k демонстрирует наличие плазмонного канала затухания. При анализе ширины Γ_s как функции энергии возбуждения отмечается сильная анизотропия, а кроме этого существенная зависимость от индекса ветви s спин-орбитально расщепленной зоны. Такая зависимость свидетельствует о спиновой асимметрии скорости затухания Γ_-/Γ_+ для заданного направления. Делается акцент на том, что асимметрия наиболее ярко проявляется в направлении $\varphi_k = 3\pi/4$, где наблюдается наибольшее различие между Γ_- и Γ_+ как функциями энергии возбуждения и, как следствие, между средними длинами свободного пробега электронов. Например, отношение

быть основана лишь на представлениях о фазовом пространстве.

2. На основе G_0W_0 расчетов времени жизни $\tau_{\uparrow(\downarrow)}$ и средней длины свободного пробега $\lambda_{\uparrow(\downarrow)}$ квазичастиц с разным направлением спина (\uparrow или \downarrow) в ферромагнитных металлах (Co, Fe, Ni) и соединениях систем Co-Fe ($B2-CoFe$, DO_3-Co_3Fe) и Ni-Fe ($L1_0-NiFe$, $L1_2-Ni_3Fe$) показано, что длина свободного пробега как функция ω обладает спиновой асимметрией, обусловленной значительной разницей как между временами жизни, так и скоростями электронов со спином вверх и спином вниз. Обнаружено, что соединения системы Co-Fe обладают наибольшей λ_{\uparrow} по сравнению с соединениями системы Ni-Fe. При этом λ_{\downarrow} близка для всех соединений. Как для системы Co-Fe, так и для Ni-Fe установлено, что для согласия результатов теоретических исследований $\lambda_{\uparrow(\downarrow)}$ с соответствующими экспериментальными данными необходимо учитывать вклад, обусловленный квазиупругим электрон-фононным рассеянием.
3. Предложен метод вычисления собственной энергии квазичастиц в лестничном приближении, основанный на вариационном решении уравнения, определяющего двухчастичную амплитуду рассеяния (T -матрицу) как в случае многократного рассеяния между двумя электронами или двумя дырками, так и в случае многократного рассеяния между электроном и дыркой. Решение получено в рамках локального приближения и выражается через локальное взаимодействие, зависящее от импульса и энергии. В случае многократного электрон-дырочного рассеяния локальное взаимодействие отождествлено с обменной частью многочастичного фактора локального поля. Расчеты, проведенные с помощью разработанных программ, реализующих метод, показали, что учет многократного рассеяния ведет к уменьшению времени жизни и спектрального веса квазичастиц, модифицирует дисперсию, снижая тенденцию к сужению зоны, наблюдаемую в G_0W_0 приближении, а также приводит к увеличению эффективной массы квазичастиц.
4. Для проверки работоспособности предложенного метода в рамках его первопринципной реализации проведены расчеты закона дисперсии и ширины линии плазмона в калии, свойства плазменных колебаний в котором не описываются в модели однородного электронного газа, несмотря на близость зонного спектра калия в области уровня Ферми к спектру свободных электронов. Хорошее согласие полученных результатов с экспериментальными данными указывает на важность учета не только реальной зонной структуры, но и многократного электрон-дырочного рассеяния в случае описания экранирующих свойств щелочного металла. Проведенные *ab initio* расчеты времени жизни квазичастиц в переходных металлах Mo и Rh показали, что и в этом случае учет многократного электрон-дырочного рассеяния в рамках предложенного метода приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными по сравнению с G_0W_0 приближением.
5. Представлена реализация G_0W_0 приближения и разработан комплекс программ для исследования ширины спектральной функции (обратного времени жизни) квазичастиц в двумерном электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием, обусловленным как структурной (взаимодействие Рашбы), так и объемной (взаимодействие Дрессельхауза) инверсионной асимметрией. При рассмотрении различных соотношений параметров, определяющих величину вкладов СОВ Рашбы (α) и Дрессельхауза (β), в случае систем со слабым спиновым расщеплением установлено, что квазичастицам с одинаковой энергией, но с разным индексом ветви спин-расщепленной зоны, соответствуют спектральные функции, различие в ширинах которых пренебрежимо

мало практически во всей энергетической области, где затухание реализуется лишь за счет образования электрон-дырочных пар. Заметным различие в ширинах становится при появлении дополнительного канала затухания за счет эмиссии плазмона. В случае $\alpha = \beta$ ширина как функция энергии принимает вид, присущий двумерному электронному газу без спин-орбитального взаимодействия.

6. Представлена и реализована модификация модели повторяющихся тонких пленок с одномерным псевдопотенциалом, позволяющая учесть расщепление поверхностного состояния, индуцированное спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Полученные в рамках G_0W_0 приближения соотношения позволили рассмотреть время жизни дырок в поверхностном состоянии на поверхности Au(111) и показать, что, несмотря на вовлечение в процессы затухания объемных состояний, как и в модели двумерного электронного газа, при заданной энергии время жизни дырки практически не зависит от ветви спин-орбитально расщепленного поверхностного состояния, что было подтверждено данными фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для поверхности Au(111).
7. Показано, что в двумерных электронных системах с сильным спиновым расщеплением, индуцированным спин-орбитальным взаимодействием, время жизни электронов, а, следовательно, и длина свободного пробега демонстрирует сильную анизотропию и зависимость от индекса ветви расщепленной зоны. Это позволяет ожидать в данном случае проявления эффекта спинового фильтра, управляемого внешним электрическим полем. Обнаружено, что в таких системах появляется также дополнительный по отношению к рождению электрон-дырочных пар канал затухания дырок за счет эмиссии плазмона. Показано, что в случае металлических поверхностей в указанный процесс затухания вовлекается поверхностный акустический плазмон.

Список публикаций

- A1. *Nechaev I. A.* Variational solution of the T -matrix integral equation / I. A. Nechaev, E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 71, № 11. P. 115104(1-7).
- A2. *Nechaev I. A.* Multiple electron-hole scattering effect on quasiparticle properties in a homogeneous electron gas / I. A. Nechaev, E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73, № 16. P. 165112(1-11).
- A3. *Chulkov E. V.* Decay of electronic excitations in bulk metals and at surfaces / E. V. Chulkov, A. Leonardo, I. A. Nechaev, V. M. Silkin // *Surf. Sci.* 2006. Vol. 600, № 18. P. 3795-3802.
- A4. *Mönnich A.* Experimental time-resolved photoemission and *ab initio* study of lifetimes of excited electrons in Mo and Rh / A. Mönnich, J. Lange, M. Bauer, M. Aeschlimann, I. A. Nechaev, V. P. Zhukov, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74, № 3. P. 035102(1-8).
- A5. *Nechaev I. A.* GW lifetimes of quasiparticle excitations in paramagnetic transition metals / I. A. Nechaev, E. V. Chulkov, P. M. Echenique // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 76, № 24. P. 245125(1-5).

- A6. *Нечаев И. А.* Ab initio расчет времени жизни квазичастичных возбуждений в переходных металлах в рамках *GW*-приближения / И. А. Нечаев, В. П. Жуков, Е. В. Чулков // ФТТ. 2007. Т. 49, № 10. С. 1729–1736.
- A7. *Нечаев И. А.* Учет обменно-корреляционных эффектов в ab initio методах расчета закона дисперсии и ширины линии плазмона в металлах / И. А. Нечаев, В. М. Силкин, Е. В. Чулков // ФТТ. 2007. Т. 49, № 10. С. 1737–1743.
- A8. *Nechaev I. A.* Theoretical study of quasiparticle inelastic lifetimes as applied to aluminum / I. A. Nechaev, I. Y. Sklyadneva, V. M. Silkin, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 78, № 8. P. 085113(1–13).
- A9. *Nechaev I. A.* Hole dynamics in a two-dimensional spin-orbit coupled electron system: Theoretical and experimental study of the Au(111) surface state / I. A. Nechaev, M. F. Jensen, E. D. L. Rienks, V. M. Silkin, P. M. Echenique, E. V. Chulkov, P. Hofmann // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 80, № 11. P. 113402(1–4).
- A10. *Нечаев И. А.* Ширина спектральной функции квазичастиц в двумерном электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием / И. А. Нечаев, Е. В. Чулков // ФТТ. 2009. Т. 51, № 9. С. 1672–1677.
- A11. *Нечаев И. А.* Свойства квазичастичных возбуждений в ферромагнитном сплаве FeCo / И. А. Нечаев, Е. В. Чулков // ФТТ. 2009. Т. 51, № 4. С. 713–719.
- A12. *Chulkov E. V.* Electronic structure and excitations on clean and nanostructured metal surfaces / E. V. Chulkov, A. Zugarramurdi, S. S. Tsirkin, X. Zubizarreta, I. A. Nechaev, I. Y. Sklyadneva, S. V. Eremeev // Eur. Phys. J. B. 2010. Vol. 75, № 1. P. 37–47.
- A13. *Nechaev I. A.* Inelastic decay rate of quasiparticles in a two-dimensional spin-orbit coupled electron system / I. A. Nechaev, P. M. Echenique, E. V. Chulkov // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81, № 19. P. 195112(1–6).
- A14. *Nechaev I. A.* Quasiparticle dynamics in ferromagnetic compounds of the Co-Fe and Ni-Fe systems / I. A. Nechaev, E. V. Chulkov // Eur. Phys. J. B. 2010. Vol. 77, № 1. P. 31–40.
- A15. *Нечаев И. А.* Особенности затухания квазичастиц в двумерных электронных системах со спин-орбитальным взаимодействием / И. А. Нечаев, В. М. Силкин, Е. В. Чулков // ЖЭТФ. 2011. Т. 139, № 1. С. 155–161.

Цитированная литература

1. *Chulkov E. V.* Electronic Excitations in Metals and at Metal Surfaces / E. V. Chulkov, A. G. Borisov, J. P. Gauyacq, D. Sánchez-Portal, V. M. Silkin, V. P. Zhukov, P. M. Echenique // Chemical Reviews. 2006. Vol. 106, № 10. P. 4160–4206.
2. *Aulbur W. G.* Solid State Physics // Ed. by H. Ehrenreich, F. Seepen. New York: Academic Press, 2000. Vol. 54. P. 1.
3. *Žutić I.* Spintronics: Fundamentals and applications / I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma // Rev. Mod. Phys. 2004. Vol. 76, № 2. P. 323–410.

4. *Giuliani G. F.* Quantum Theory of the Electron Liquid / G. F. Giuliani, G. Vignale. Cambridge : Cambridge University Press, 2005.
5. *Romaniello P.* Beyond the *GW* approximation: Combining correlation channels / P. Romaniello, F. Bechstedt, L. Reining // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 85, № 15. P. 155131(1-15).
6. *Hertz J. A.* Intermediate-Coupling Theory for Itinerant Ferromagnetism / J. A. Hertz, D. M. Edwards // Phys. Rev. Lett. 1972. Vol. 28, № 20. P. 1334-1337.
7. *Riseborough P. S.* Spin-fluctuation contribution to the high-frequency electrical conductivity of nearly magnetic transition metals // Phys. Rev. B. 1983. Vol. 27, № 9. P. 5775-5783.
8. *Ast C. R.* Spin-orbit split two-dimensional electron gas with tunable Rashba and Fermi energy / C. R. Ast, D. Pacil , L. Moreschini et al. // Phys. Rev. B. 2008. Vol. 77, № 8. P. 081407(1-4).
9. *Studer M.* Gate-Controlled Spin-Orbit Interaction in a Parabolic GaAs/AlGaAs Quantum Well / M. Studer, G. Salis, K. Ensslin, D. C. Driscoll, A. C. Gossard // Phys. Rev. Lett. 2009. Vol. 103, № 2. P. 027201(1-4).
10. *Bernevig B. A.* Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System / B. A. Bernevig, J. Orenstein, S.-C. Zhang // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97, № 23. P. 236601(1-4).
11. *Korulek J. D.* Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells / J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S.-C. Zhang, S. Mack, D. D. Awschalom // Nature. 2009. Vol. 458, № 7238. P. 610-613.
12. *Kliewer J.* Dimensionality Effects in the Lifetime of Surface States / J. Kliewer, R. Berndt, E. V. Chulkov, V. M. Silkin, P. M. Echenique, S. Crampin // Science. 2000. Vol. 288, № 5470. P. 1399-1402.
13. *Silkin V. M.* Acoustic surface plasmons in the noble metals Cu, Ag, and Au / V. M. Silkin, J. M. Pitarke, E. V. Chulkov, P. M. Echenique // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72, № 11. P. 115435(1-7).
14. *Diaconescu B.* Low-energy acoustic plasmons at metal surfaces / B. Diaconescu, K. Pohl, L. Vattuone et al. // Nature. 2007. Vol. 448, № 7149. P. 57-59.
15. *Hedin L.* New Method for Calculating the One-Particle Green's Function with Application to the Electron-Gas Problem // Phys. Rev. 1965. Vol. 139, № 3A. P. A796-A823.
16. *Aryasetiawan F.* Generalized Hedin's Equations for Quantum Many-Body Systems with Spin-Dependent Interactions / F. Aryasetiawan, S. Biermann // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100, № 11. P. 116402(1-4).
17. *Zhukov V. P.* Lifetimes of excited electrons in Ta: Experimental time-resolved photoemission data and first-principles GW + T theory / V. P. Zhukov, O. Andreyev, D. Hoffmann, M. Bauer, M. Aeschlimann, E. V. Chulkov, P. M. Echenique // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70, № 23. P. 233106(1-4).
18. *Quinn J. J.* Electron Self-Energy Approach to Correlation in a Degenerate Electron Gas / J. J. Quinn, R. A. Ferrell // Phys. Rev. 1958. Vol. 112, № 3. P. 812-827.

19. *van Dijken S.* Spin-dependent hot electron transport in $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ and $\text{Co}_{84}\text{Fe}_{16}$ films on $\text{GaAs}(001)$ / S. van Dijken, X. Jiang, S. S. P. Parkin // *Phys. Rev. B.* 2002. Vol. 66, № 9. P. 094417(1-7).
20. *Knorren R.* Dynamics of excited electrons in copper and ferromagnetic transition metals: Theory and experiment / R. Knorren, K. H. Bennemann, R. Burgermeister, M. Aeschli-mann // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 61, № 14. P. 9427-9440.
21. *Richardson C.* Dynamical local-field and effective interactions in the three-dimensional electron liquid / C. Richardson, N. Ashcroft // *Phys. Rev. B.* 1994. Vol. 50, № 12. P. 8170-8181.
22. *Zhang Y.* Dispersion instability in strongly interacting electron liquids / Y. Zhang, V. M. Yakovenko, S. Das Sarma // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 71, № 11. P. 115105(1-10).
23. *Gori-Giorgi P.* Momentum distribution of the uniform electron gas: Improved parametrization and exact limits of the cumulant expansion / P. Gori-Giorgi, P. Ziesche // *Phys. Rev. B.* 2002. Vol. 66, № 23. P. 235116.
24. *Ortiz G.* Correlation energy, structure factor, radial distribution function, and momentum distribution of the spin-polarized uniform electron gas / G. Ortiz, P. Ballone // *Phys. Rev. B.* 1994. Vol. 50, № 3. P. 1391-1405.
25. *Nakano A.* Dynamic correlations in electron liquids. II. Single-particle Green's functions / A. Nakano, S. Ichimaru // *Phys. Rev. B.* 1989. Vol. 39, № 8. P. 4938-4944.
26. *Rietschel H.* Role of electron Coulomb interaction in superconductivity / H. Rietschel, L. J. Sham // *Phys. Rev. B.* 1983. Vol. 28, № 9. P. 5100-5108.
27. *von Barth U.* Self-consistent GW_0 results for the electron gas: Fixed screened potential W_0 within the random-phase approximation / U. von Barth, B. Holm // *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54, № 12. P. 8411-8419.
28. *Mahan G.* Electron-electron interactions and bandwidth of metals / G. Mahan, B. Ser-nelius // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62, № 23. P. 2718-2720.
29. *vom Felde A.* Valence-electron excitations in the alkali metals / A. vom Felde, J. Sprösser-Prou, J. Fink // *Phys. Rev. B.* 1989. Vol. 40, № 15. P. 10181-10193.
30. *Badalyan S. M.* Anisotropic plasmons in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction / S. M. Badalyan, A. Matos-Abiague, G. Vignale, J. Fabian // *Phys. Rev. B.* 2009. Vol. 79, № 20. P. 205305(1-5).

10²

Усл. печ. л. 1,86. Подписано в печать 3.10.2012.

Тираж 100. Заказ 1053.

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники.

634050, г. Томск, пр. Ленина, 40.

Тел. 533018.