УДК 539.124:539.292.01

Ф. А. Живописцев
Ф. Э. Комас

МНОГОЭЛЕКТРОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРАХ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛАХ (I)

Изучается процесс неупругого рассеяния электронов в металлах (e, e'). Показано, что динамический форм-фактор, учитывающий переход электрона с атомного уровня на поверхность Ферми, выражается через двухчастичную функцию Грина (в канале электрон зоны проводимости — внутренняя дырка), при этом выражение для динамического форм-фактора справедливо по всему диапазону частот спектра (не только у края поглощения).

В последнее время был выполнен ряд работ [1—4], посвященных исследованию поведения рентгеновских спектров металлов у коротковолнового края (спектры эмиссии) и у края поглощения (спектры поглощения), т. е. в тех случаях, когда электрон переходит с поверхности Ферми на атомный уровень либо выбрасывается с атомного уровня на поверхность Ферми. При учете взаимодействия электронов с дыркой на атомном уровне (внутренней дыркой) было обнаружено, что амплитуда перехода электрона с поверхности или на поверхность Ферми имеет особенность. Эта особенность появляется вследствие учета многоэлектронных эффектов и указывает на нетривиальный характер влияния этих эффектов на рентгеновские спектры. В этой связи особый интерес приобретают эксперименты по неупругому рассеянию электронов в металлах [5—7].

В настоящей работе изучается процесс неупругого рассеяния электронов в металлах (e, e'). Показано, что динамический форм-фактор (ДФФ) выражается через двухчастичную функцию Грина; основная часть ДФФ, учитывающего переход электрона с атомного уровня на поверхность Ферми, выражается через двухчастичную функцию Грина (в канале электрон — внутренняя дырка). При этом выражение для ДФФ справедливо по всему диапазону спектра (не только у края поглощения).

Динамический форм-фактор (e, e'). В первом порядке нестационарной теории возмущений вероятность того, что в единицу времени быстрый (внешний) электрон передаст импульс $\mathbf{q}$ и энергию ω, записывается в виде [8—10]

$$W(\mathbf{q}, \omega) = 2\pi \left(\frac{4\pi e^2}{q^2}\right)^2 \sum_s |\langle s|\rho_{\mathbf{q}}^{+}|0\rangle|^2 \,\delta(\omega - \omega_{s0}), \quad (1)$$

где $\rho_{\mathbf{q}}$ — оператор флуктуации плотности частиц, $|s\rangle$ — возбужденное состояние системы, $|0\rangle$ — основное состояние, $\omega_{s0} = \varepsilon_s - \varepsilon_0$ — энергия возбуждения:

$$\omega_{s0} = \omega = \frac{1}{m}\left(\mathbf{pq} - \frac{1}{2}q^2\right), \quad (2)$$

где $\mathbf{p}$ — начальный импульс внешнего электрона, $|\mathbf{q}| = q$.

Величина передаваемого импульса q определяется соотношением

$$q^2 = 2p^2 \left[1 - \left| 1 - \frac{\omega}{E} \right|^{1/2} \cos\theta - \frac{\omega}{2E} \right], \tag{3}$$

где $E = \frac{1}{2m} p^2$, θ — угол рассеяния (угол между $\mathbf{q}$ и $\mathbf{p}-\mathbf{q}$). Если $\omega \ll E$, то для q получим

$$q \simeq 2p \left(1 - \frac{\omega}{4E} \right) \sin\frac{\theta}{2}. \tag{4}$$

В этом приближении q практически от ω не зависит для всех интересуемых значений ω $\left(\text{при } \frac{\omega}{4E} \ll 1 \right)$. ДФФ определяется следующим соотношением:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \sum_s |\langle s | \rho_{\mathbf{q}}^{+} | 0 \rangle|^2 \, \delta(\omega - \omega_{s0}). \tag{5}$$

Легко показать, что выражение (5) для $S(\mathbf{q}, \omega)$ можно представить в виде

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^\infty dt \exp(i\omega t)\, \Pi(\mathbf{q}, t), \tag{6}$$

где $\Pi(\mathbf{q}, t) = \langle 0 | \rho_{\mathbf{q}}(t) \rho_{\mathbf{q}}^{+}(0) | 0 \rangle$ — корреляционная функция. Общее выражение для оператора флуктуации плотности $\rho_{\mathbf{q}}$ имеет вид

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{p}} M_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})\, a_{\mathbf{p}}^{+} b + \sum_{\mathbf{p}} M_{\mathbf{p}}^{*}(-\mathbf{q})\, b^{+} a_{\mathbf{p}} +$$

$$+ \int \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{x}) |\Phi(\mathbf{x})|^2 d^3x\, b^{+} b +$$

$$+ \sum_{\mathbf{p},\mathbf{p}'} \int d^3x \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{x})\, \psi_{\mathbf{p}}^{*}(\mathbf{x})\, \psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})\, a_{\mathbf{p}}^{+} a_{\mathbf{p}'}, \tag{7}$$

где

$$M_{\mathbf{p}}(\mathbf{q}) = \int d^3x \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{x})\, \psi_{\mathbf{p}}^{*}(\mathbf{x})\, \Phi(\mathbf{x}), \tag{8}$$

$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})$ — волновая функция электрона зоны проводимости, $\Phi(\mathbf{x})$ — волновая функция внутреннего электрона (на атомном уровне); $a_{\mathbf{p}}$, $a_{\mathbf{p}}^{+}$ — операторы уничтожения и рождения электронов зоны проводимости; b, b^{+} — операторы уничтожения и рождения внутреннего электрона соответственно.

Для простоты рассмотрения процесса неупругого рассеяния (e, e'), когда выбивается сильносвязанный электрон из заполненной внутренней оболочки атома в металл, предположим, что а) внутренняя дырка не размножается; б) наличие у нее импульса $(-\mathbf{q})$ отдачи несущественно (что связано с бесконечной эффективной массой); в) температурными эффектами и шириной внутреннего уровня пренебрегаем.

Пусть основное состояние описывается вектором $|0>$ (внутренняя оболочка атома заполнена), тогда, используя (7), для $\Pi(\mathbf{q}, t)$ получим

$$\Pi(\mathbf{q}, t) = \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} M_{\mathbf{p}}^{*}(-\mathbf{q})\, M_{\mathbf{p}'}(-\mathbf{q})\, \langle 0 | b^{+}(t)\, a_{\mathbf{p}}(t)\, a_{\mathbf{p}'}^{+}(0)\, b(0) | 0 \rangle +$$

$$+\sum_{\mathbf{pp}'}\int d^3\mathbf{x}'\exp(-i\,\mathbf{qx})\,\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x})\,\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x})\int d^3x'\exp(i\,\mathbf{qx}')\,|\Phi(\mathbf{x}')|^2\times$$

$$\times\langle 0|a^{+}_{\mathbf{p}}(t)\,a_{\mathbf{p}'}(t)\,b^{+}(0)\,b(0)|0\rangle+\sum_{\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\mathbf{p}_3\mathbf{p}_4}\int d^3x\exp(-i\,\mathbf{qx})\times$$

$$\times\psi^*_{\mathbf{p}_1}(\mathbf{x})\,\psi_{\mathbf{p}_2}(\mathbf{x})\int d^3x'\exp(i\,\mathbf{qx})\,\psi^*_{\mathbf{p}_3}(\mathbf{x}')\,\psi_{\mathbf{p}_4}(\mathbf{x}')\times$$

$$\times\langle 0|a^{+}_{\mathbf{p}_1}(t)\,a_{\mathbf{p}_2}(t)\,a^{+}_{\mathbf{p}_3}(0)\,a_{\mathbf{p}_4}(0)|0\rangle, \tag{9}$$

где $a(t)$, $b(t)$ — операторы электронов в представлении Гейзенберга.

Первый член в выражении (9) описывает переход с атомного уровня в зону проводимости, второй и третий члены описывают флуктуации фона. В дальнейшем мы ограничимся первым членом в выражении (9). Легко показать, что

$$\Pi(\mathbf{q},t)=\sum_{\mathbf{pp}'}M^*_{\mathbf{p}}(-\mathbf{q})\,M_{\mathbf{p}'}(-\mathbf{q})\,G_{\mathbf{pp}'}(t), \tag{10}$$

где

$$G_{\mathbf{pp}'}(t)=\langle 0|T\{b^{+}(t)\,a_{\mathbf{p}}(t)\,a^{+}_{p'}(0)\,b(0)\}|0\rangle$$

причинная двухчастичная функция Грина (в канале электрон зоны проводимости — внутренняя дырка).

Окончательно для ДФФ получим соотношение

$$S(\mathbf{q},\omega)=\frac{1}{\pi}\operatorname{Re}\sum_{\mathbf{pp}'}M^*_{\mathbf{p}'}(-\mathbf{q})\,M_{\mathbf{p}'}(-\mathbf{q})\int\limits_{-\infty}^{+\infty}dt\exp(i\,\omega t)\,G_{\mathbf{pp}'}(t)=$$

$$=\frac{1}{\pi}\operatorname{Re}\sum_{\mathbf{pp}'}M^*_{\mathbf{p}}(-\mathbf{q})\,M_{\mathbf{p}'}(-\mathbf{q})\,G_{\mathbf{pp}'}(\omega)=\frac{1}{\pi}\operatorname{Re}\Pi(\mathbf{q},\omega). \tag{11}$$

Поведение функции $\Pi(\mathbf{q},\omega)$. Следуя работе Нозьера и де Доминисиса [3], матричный элемент $M_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})$ представим в виде

$$M_{\mathbf{p}}(\mathbf{q})=\sum_{lm}M_l(\mathbf{q})\,U_l(\varepsilon_{\mathbf{p}})\,Y_{lm}(\hat{\mathbf{p}}), \tag{12}$$

где

$$U_l(\varepsilon_{\mathbf{p}})=\begin{cases}1, & |\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_F|<\xi_0\\ 0, & |\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_F|>\xi_0,\end{cases}$$

ξ_0 — фактор обрезания, ε_F — энергия Ферми. Подставляя (12) в (11), нетрудно получить

$$\operatorname{Re}\Pi(\mathbf{q},\omega)=\sum_l(2l+1)^2\,|M_l(-\mathbf{q})|^2\,G_l(\omega), \tag{13}$$

где

$$G_l(\omega)=\sum_{\mathbf{pp}'}U_l(\varepsilon_{\mathbf{p}})\operatorname{Re}G_{\mathbf{pp}'}(\omega)\,U_l(\varepsilon_{\mathbf{p}'})$$

— спектральная функция.

В работе Нозьера и де Доминисиса [3] получено асимптотическое поведение $G_l(\omega)$ при $|\xi_0 t|\gg 1$:

$$G_l(t)=L_l(t)\,g(t), \tag{14}$$

где

$$L_l(t) = A|i\xi_0 t|^{\frac{2\delta_l}{\pi}-1},$$

$$g(t) = -i\theta(-t)\exp(-i\omega_0 t)|i\xi_0 t|^{-\varepsilon},$$

$$\varepsilon = 2\sum_l (2l+1)\left(\frac{\delta_l}{\pi}\right)^2, \quad A \sim \nu_0,$$

ν_0 — плотность состояний вблизи границы Ферми, δ_l — разовые сдвиги рассеяния электронов зоны проводимости внутренней дыркой, $\omega_0 = \varepsilon_F - E$, E — энергия внутренней дырки.

Итак, для $G_l(t)$ получим следующее выражение:

$$G_l(t) = A\theta(-t)\exp(t\omega_0' t)|i\xi_0 t|^{\alpha_l - 1}, \tag{15}$$

где $\alpha_l = \frac{2\delta_l}{\pi} - \varepsilon$ — показатель Нозьера — де Доминисиса. Из (15) для спектральной функции $G_l(\omega)$ получим

$$G_l(\omega) = A_l\left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}\theta(\omega-\omega_0), \tag{16}$$

где

$$A_l = A\Gamma(\alpha_l).$$

Окончательно получим для $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ следующее выражение:

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = \sum_l (2l+1)^2 A_l|M_l(-\mathbf{q})|^2\left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}\theta(\omega-\omega_0). \tag{17}$$

Во-первых, следует отметить, что выражение (17) для $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ критически зависит от знака α_l; во-вторых, в выражение (17) входит величина $|M_l(-\mathbf{q})|^2$, которая зависит от q. При $E \gg \omega\, q$ практически не зависит от ω, поэтому основная зависимость $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ от ω определяется членом $\left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}$. Для вероятности процесса (e, e'), определяемого соотношением (1), получим

$$W(\mathbf{q}, \omega) = 32\pi^2 e^4 \operatorname{Re}\sum_l (2l+1)^2 A_l f_l(q)\left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}\theta(\omega-\omega_0). \tag{18}$$

Для данного значения q функция $f_l(q)$ определяет, какие значения l дают основной вклад в $W(\mathbf{q}, \omega)$. Соответствующие значения α_l легко получить, вычисляя фазы δ_l и учитывая правило Фриделя

$$2\sum_l (2l+1)\frac{\delta_l}{\pi} = 1.$$

Выражение (18) для $W(\mathbf{q}, \omega)$ строго имеет физический смысл для значений ω вблизи порога ω_0. Вдали от порога ω_0 полученное выражение (18) становится несправедливым. Для получения выражения $W(\mathbf{q}, \omega)$, справедливого во всей области частот спектра, требуется найти поведение $G_l(t)$ для $|\xi_0 t| \gtrsim 1$. Недавно Махану [4] удалось получить более общее выражение для $G_l(t)$:

$$G_l(t) = A_l\theta(-t)\exp(-i\omega_0 t)|1 + i\xi_0 t|^{\alpha_l - 1}, \tag{19}$$

которое совпадает с прежним выражением (15) при $|\xi_0 t| \gg 1$.

Из (19) нетрудно получить

$$G_l(\omega) = B_l \exp\left(-\frac{\omega-\omega_0}{\xi_0}\right)\left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}\theta(\omega-\omega_0). \tag{20}$$

Используя (20), для $W(\mathbf{q}, \omega)$ получим обобщенное выражение, справедливое по всему диапазону частот спектра:

$$W(\mathbf{q}, \omega) = 32\pi^2 e^4 \operatorname{Re}\sum_l (2l+1)^2 B_l f_l(q) \exp\left(-\frac{\omega-\omega_0}{\xi_0}\right) \times$$
$$\times \left|\frac{\xi_0}{\omega-\omega_0}\right|^{\alpha_l}\theta(\omega-\omega_0). \tag{21}$$

Исследование функции $f_l(q)$. Функция $f_l(q)$ определяется соотношением

$$f_l(q) = \frac{1}{q^4}|M_l(-\mathbf{q})|^2, \tag{22}$$

$f_l(q)$ определяет относительные вклады в $W(\mathbf{q}, \omega)$ от различных значений l.

Разложим $M_\mathbf{p}(\mathbf{q})$ по сферическим функциям. Для этого необходимо определить волновую функцию $\Phi(\mathbf{x})$ внутренней дырки. Предположим, что внутренний уровень описывается как S-состояние (например, для Li, Be) [11]:

$$\Phi(r) = \left[\frac{\lambda^3}{\pi}\right]^{1/2}\exp(-\lambda r), \tag{23}$$

где $1/\lambda$ — длина экранирования. Функция $\psi_\mathbf{p}(\mathbf{x})$ для электронов зоны проводимости выбирается в виде

$$\psi_\mathbf{p}(\mathbf{x}) = \exp(i\,\mathbf{px}) - \Phi^*(\mathbf{p})\,\Phi(\mathbf{x}), \tag{24}$$

где $\Phi(\mathbf{p})$ — фурье-образ функции $\Phi(\mathbf{x})$.

Итак, после несложных преобразований получим

$$M_\mathbf{p}(\mathbf{q}) = (4\pi)^{3/2}\sum_l \{(-i)^{2l}(2l+1)^{1/2}B_l(q) - \Phi(\mathbf{p})\,A(\mathbf{q})\,\delta_{l0}\}\,Y_{l0}(\hat{\mathbf{q}}), \tag{25}$$

где

$$B_l(q) = \int_0^\infty r^2\,dr\,\Phi(r)\,j_l(qr)\,j_l(pr),$$

$$A_q = \int_0^\infty r^2\,dr\,|\Phi(r)|^2\,j_0(qr).$$

При $p = p_F$ имеем

$$M_l(q) = (4\pi)^{3/2}\{(i)^{2l}(2l+1)^{1/2}B_l(q) - \delta_{l0}\,\Phi(p_F)\,A(q)\}. \tag{26}$$

Для $f_l(q)$ соответственно получим

$$f_l(q) = (4\pi)^3\left|(-i)^{2l}(2l+1)^{1/2}\frac{B_l(q)}{q^2} - \delta_{l0}\,\Phi(p_F)\,\frac{A(q)}{q^2}\right|^2. \tag{27}$$

Для первых значений $l = 0, 1, 2$ получим

$$f_0(q) = 256\,\pi^2\lambda^5\left|\frac{1}{[\lambda^2+(p_F-q)^2]\,[\lambda^2+(p_F+q)^2]\,q^2} - \right.$$
$$\left. - \frac{16\lambda^4}{[\lambda^2+p_F^2]^2\,[4\lambda^2+q^2]^2\,q^2}\right|^2,$$

$$f_1(q) = \frac{192\,\pi^2\lambda^5}{p_F^2}\left|\frac{1}{4p_F\,q^4}\ln\left|\frac{\lambda^2+(q+p_F)^2}{\lambda^2+(q-p_F)^2}\right| - \right.$$

$$\left. - \frac{\lambda^2+p_F^2+q^2}{q^3\,[\lambda^2+(q-p_F)^2]\,[\lambda^2+(q+p_F)^2]}\right|^2,$$

$$f_2(q) \simeq \frac{5\cdot 10^3\,\pi^2\,p_F^4}{\lambda''}\left[1-\frac{4p_F^2}{\lambda^2}\right]. \qquad (28)$$

Из выражений (28) видно, что функции f_0 и f_1 значительно больше f_2 (аналогичное утверждение имеет место для $l=3, 4, \ldots$ и т. д.). Нетрудно показать, что

$$\lim_{q\to 0} f_0(q) = \frac{64\,\pi^2\lambda^5}{(\lambda^2+p_F^2)^4}\left[\frac{1}{2\lambda^2}-\frac{2(1+p_F)}{\lambda^2+p_F^2}\right]. \qquad (29)$$

$$\lim_{q\to 0} f_1(q) \to \infty$$

Из (29) видно, что при $q\approx 0$ основной вклад определяется $l=1$, а для $q>0$ — $l=0$. Полученные результаты согласуются с выводами, сделанными при исследовании рассеяния рентгеновских лучей в металлах [12].

В работе получено обобщенное выражение для вероятности процесса (e, e') с возбуждением внутреннего электрона, справедливое в широком диапазоне частот спектра (не только у края поглощения). Полученная формула для (21) $W(\mathbf{q}, \omega)$ показывает, что вероятность процесса (e, e') критически зависит от знака показателя α_l, причем вклады от различных l определяются функцией $f_l(q)$. На основании данных работы [11] для простых металлов (Li, Be, Na и т. д.) получим $\alpha_l>0$, $\alpha_l<0$ при $l\geqslant 1$. Следовательно, при изменении угла рассеяния θ для процесса (e, e') (например Li) должно наблюдаться резкое изменение в спектре рассеянных электронов: для $\theta\approx 0$ $(q\approx 0)$ — нулевое значение у порога ω_0 $(\alpha_1>0)$, для значений $\theta\gg 0$ — сингулярное поведение у порога $\omega_0(\alpha_0>0)$. В этой связи особенно интересны эксперименты по (e, e') [7].

ЛИТЕРАТУРА

1. Anderson P. «Phys. Rev. Lett.». 1967, **18**, 1049.
2. Mahan G. «Phys. Rev.», 1967, **163**, 612.
3. Nozieres P., de Dominicis C. «Phys. Rev.», 1969, **178**, 1097.
4. Mahan G. «Phys. Rev.», 1975, **B11**, 4814.
5. Ritsko J., Schanatterly S.. Gibbons P. «Phys. Rev.», 1974, **B10**, 5017.
6. Slusky Susan, Gibbons P., Schanatterly S., Fields J. «Phys. Rev. Lett.», 1976, **36**, 326.
7. Gibbons P., Schanatterly S., Ritsko J., Fields J. «Phys. Rev.», 1976, **B13**, 245.
8. Pines D. «Rev. Mod. Phys.», 1956, 28, 184.
9. Nozieres P., Pines D. «Phys. Rev.». 1959, **113**, 1254.
10. Pines D. Elementary Excitations in Solids, N. Y.. 1963.
11. Ausman G.. Glick A. «Phys. Rev.». 1969, **183**, 687.
12. Doniach S., Platzman P., Yue T. «Phys. Rev.», 1971, **B4**, 3345.

Поступила в редакцию
22.7 1977 г.
НИИЯФ