УДК 533.9.01:539.171:539.262

Ф. А. ЖИВОПИСЦЕВ, Ф. Э. КОМАС (Куба)

ЭФФЕКТ ДИСПЕРСИИ ПЛАЗМОНОВ В НЕУПРУГОМ РАССЕЯНИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ ВНУТРЕННЕЙ ДЫРКИ В МЕТАЛЛАХ

1. Многоэлектронные эффекты играют весьма существенную роль во многих физических процессах, когда электрон либо переходит с поверхности Ферми на атомный уровень, либо выбрасывается с атомного уровня на поверхность Ферми. Такие процессы характерны, например, для поглощения и испускания рентгеновских лучей [1—2], для рассеяния быстрых электронов в металле [3]. Учет плазменных колебаний электронов проводимости приводит к появлению типичных плазменных пиков в спектре [4, 5], причем плазменные пики могут носить резкий сингулярный характер в зависимости от знака показателя Нозьера — Доминисиса [4, 5]. В работе [3] показано, что амплитуда перехода процесса (e, e') выражается через двухчастичную функцию Грина (в канале электрон зоны проводимости — внутренняя дырка):

$$G_{\mathbf{kk}'}(t, t') = \langle 0 | T \{ b(t) a_{\mathbf{k}}(t) b^{+}(t') a_{\mathbf{k}'}^{+}(t') | 0 \rangle, \tag{1}$$

где $b(t)$, $b^{+}(t)$ — операторы уничтожения и рождения внутреннего электрона (на атомном уровне) в представлении Гейзенберга; $a_{\mathbf{k}}(t)$, $a_{\mathbf{k}}^{+}(t)$ — операторы уничтожения и рождения электрона в зоне проводимости соответственно. Спектральная функция $G_l(t)$ (соответствующая функции $G_{\mathbf{kk}'}(t)$) записывается в виде [2]:

$$G_l(t) = L_l(t) g(t), \tag{2}$$

где $L_l(t)$ — модифицированная функция Грина электрона, $g(t)$ — функция Грина внутренней дырки. Если рассматривать систему электронов и плазмонов, взаимодействующих с внутренней дыркой, и пренебречь корреляциями между плазмонами и между электронами и плазмонами, то для $G_l(t)$ получается следующее выражение:

$$G_l^p(t) = L_l(t) g(t) \exp(C_p(t)). \tag{3}$$

Как показано в [4, 5],

$$F_l(t) = L_l(t) g(t) = \mathrm{A}\theta(-t) | i \xi_0 t |^{\alpha_l - 1} (i \omega_0 t), \tag{4}$$

где

$$\alpha_l = \frac{2\delta_l}{\pi} - 2 \sum_{l'} (2l' + 1) \left(\frac{\delta_{l'}}{\pi} \right)^2,$$

δ_l — фазовые сдвиги рассеяния электронов проводимости в потенциале внутренней дырки, ξ_0 — параметр обрезания по энергии, ω_0 — частота порога.

Плазменные эффекты в нашем приближении содержатся в показателе экспоненты $C_p(t)$. Явный вид $C_p(t)$ дается в работе Лангреца [4]:

$$C_p(t) = -\sum_q \left(\frac{\gamma_q}{\omega_q}\right)^2 (1 + i\,\omega_q t - \exp(i\,\omega_q t)), \tag{5}$$

где $\gamma_q^2 = \frac{2\pi e^2}{q^2} \frac{\omega_p^2}{\omega_p}$ — параметр связи между плазмонами и внутренней дыркой, $\omega_q = \omega_p + \varkappa q^2$ при $q < q_c$, q_c — предельное значение вектора q в случае существования плазмонов. В указанных работах [4, 5] законом дисперсии плазмонов пренебрегали, т. е. полагали $\omega_q = \omega_p$. Параметр $\varkappa$ имеет вид

$$\varkappa = \frac{3}{10} \frac{v_F^2}{\omega_p},$$

где v_F — скорость Ферми. Граничному вектору q_c соответствует граничное значение частоты ω_c.

2. Нахождение функции $C_p(t)$ с учетом дисперсии плазмонов. Из выражения (5) для $C_p(t)$ получим

$$C_p(t) = -a + i\,bt + \sum_q \left(\frac{\gamma_q}{\omega_q}\right)^2 \exp(i\,\omega_q t). \tag{6}$$

Параметры a и b определяются соотношениями

$$a = \sum_q \left(\frac{\gamma_q}{\omega_q}\right)^2 = \frac{e^2 \omega_p}{4\pi \varkappa^{1/2}} \left[\frac{(\omega_c - \omega_p)^{1/2} \cdot (1 + 3\omega_c)}{\omega_c^2} + \right.$$
$$\left. + \frac{3}{2\omega_p^{3/2}} \operatorname{arctg} \left(\frac{\omega_c}{\omega_p} - 1\right)^{1/2} \right], \tag{7}$$

$$b = \sum_q \frac{\gamma_q^2}{\omega_q} = \frac{e^2 \omega_p}{2\,\pi \varkappa^{1/2}} \left[\frac{(\omega_c - \omega_p)^{1/2}}{\omega_c} + \frac{1}{\omega_p^{1/2}} \operatorname{arctg} \left(\frac{\omega_c}{\omega_p} - 1\right)^{1/2} \right]. \tag{8}$$

Обозначим последний член в (6) через $J(t)$, тогда, подставляя (6) в (3), получим

$$G_l(t) = F_l(t) \exp[-a - i\,bt + J(t)], \tag{9}$$

где

$$J(t) = \sum_q \left(\frac{\gamma_q}{\omega_q}\right)^2 \exp(i\,\omega_q t) = \frac{e^2 \omega_p^2}{\pi \varkappa^{1/2}} \int\limits_0^{(\omega_c - \omega_p)^{1/2}} \frac{\exp[i\,(x^2 + \omega_p)\,t]\,dx}{(x^2 + \omega_p)^3}. \tag{10}$$

В дальнейшем будем считать, что множитель $\exp(-a)$ включен в константу A, а множитель $\exp(-ibt)$ приводит к перенормировке частоты: $\omega_0 \to \omega_0 + b$. Итак, имеем

$$G_l(t) = F_l(t)\, B(t), \tag{11}$$

где

$$B(t) = \exp(J(t)).$$

Для Фурье-образа $G_l(\omega)$ получим

$$G_l(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon}{2\pi} F_l(\varepsilon) B(\omega - \varepsilon), \tag{12}$$

где $F_l(\varepsilon)$, $B(\omega-\varepsilon)$ — Фурье-образы величин $F_l(t)$ и $B(t)$.
Для $F_l(\varepsilon)$ имеем следующее выражение [4, 5]:

$$F_l(\varepsilon) = A_l \left| \frac{\xi_0}{\varepsilon} \right|^{\alpha_l} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\xi_0}\right), \tag{13}$$

где

$$A_l = \frac{A}{\xi_0} \Gamma(\alpha_l).$$

В формуле (13) мы положили условно $\omega_0=0$, множитель $\exp\left(-\frac{\varepsilon}{\xi_0}\right)$ появился за счет обобщения, сделанного Маханом [6], чтобы изучить спектр не только у порога, но и во всем диапазоне частот.

Фурье-образ $B(\varepsilon)$ преобразуем к виду

$$B(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp[i\varepsilon t + J(t)]\, dt =$$

$$= \sum_n \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i\varepsilon t) J^n(t)\, dt. \tag{14}$$

Ограничиваясь двумя первыми членами разложения в (14), получим

$$B(\varepsilon) \cong 2\pi\delta(\varepsilon) + \beta \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{(\omega_c-\omega_p)^{1/2}} dx \frac{\exp[i(x^2+\varepsilon+\omega_p t)]}{(x^2+\omega_p)^3}, \tag{15}$$

где

$$\beta = \frac{e^2\omega_p^2}{\pi\varkappa^{1/2}} = \left[\frac{10}{3}\right]^{1/2} \frac{e^2\omega_p^{5/2}}{\pi v_F}.$$

После несложных преобразований из (15) следует

$$B(\varepsilon) = 2\pi\delta(\varepsilon) + \pi\beta \int_0^{\omega_c-\omega_p} \frac{\delta(u+\varepsilon+\omega_p)\, du}{u^{1/2}(u+\omega_p)^3}. \tag{16}$$

Используя (12) и (16) для $G_l(\omega)$, получим

$$G_l(\omega) = F_l(\omega) + 1/2\beta \int_0^{\omega_c-\omega_p} F_l(\omega+u+\omega_p) \frac{du}{u^{1/2}(u+\omega_p)^3}. \tag{17}$$

Подставляя (13) в (17), легко получить, что

$$G_l(\omega) = A_l \left|\frac{\xi_0}{\omega}\right|^{\alpha_l} \exp\left(-\frac{\omega}{\xi_0}\right) + \beta A_l \exp\left(-\frac{\omega+\omega_p}{\xi_0}\right) K_l(\omega), \tag{18}$$

где

$$K_l(\omega) = \int_0^{(\omega_c-\omega_p)^{1/2}} \frac{\exp\left(-\frac{u^2}{\xi_0}\right) du}{(u^2+\omega-\omega_p)^{\alpha_l} (u^2+\omega_p)^3}. \tag{19}$$

Из полученного выражения (18) для $G_l(\omega)$ видно, что первый член дает результат Махана — Нозьера — Доминисиса без учета плазмонов, т. е. при $\alpha_l>0$ имеется особенность типа $(\omega-\omega_0)^{-\alpha_l}$ (сингулярное поведение) вблизи порога $\omega=\omega_0$. Второй член в (18) связан с плазменными эффектами. В работах [4, 5] аналогичная поправка (без учета дисперсии плазмонов) привела к особенностям типа $(\omega-\omega_1)^{-\alpha_l}$ при $\omega_1=\omega_0+\omega_p$ (первый плазменный пик). В нашем случае такого пика нет, т. е. учет закона дисперсии плазмонов снимает первый сингулярный пик (остальные сингулярные пики ($n=2, 3, \ldots$) также снимаются, если учесть соответствующие члены в разложении по степеням $J(t)$ в выражении (14)). Действительно, можно убедиться, что $K_l(\omega)$ является плавной функцией от ω. Легко заметить, что

$$K_l(\omega) < \int_0^{(\omega_c-\omega_p)^{1/2}} \frac{du}{(u^2+\omega-\omega_p)^{\alpha_l}}. \tag{20}$$

Интеграл в правой части неравенства (20) имеет конечное значение для всех значений ω. При $\omega=\omega_p$ (первый плазменный пик) имеем

$$K_l(\omega_p) < \frac{(\omega_c-\omega_p)^{1/2-\alpha_l}}{1-2\alpha_l},$$

откуда видно, что $K_l(\omega)$ имеет конечное значение при $\omega=\omega_p$. Итак, при учете дисперсии плазмонов сингулярное поведение типа $(\omega-\omega_n)^{-\alpha_l}$ дифференциального сечения процесса (e, e') при $\omega=\omega_n$ (без учета дисперсии плазмонов) сводится к конечным небольшим пикам (максимумам) при $\omega=\omega_n$ (сингулярных пиков нет), а сингулярность типа $(\omega-\omega_0-b)^{-\alpha_l}$ остается лишь при $\omega=\omega_0+b$ (со сдвигом на величину b).

Проведенное исследование процесса (e, e') с возбуждением внутренней дырки в металлах предсказывает либо сингулярное поведение $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ при $\omega=\omega_0+b$ $(\alpha_l>0)$, либо обращение в нуль $(\alpha_l<0)$, и максимумы (минимумы) при $\omega=\omega_n$ соответственно при $\alpha_l>0$, $\alpha_l<0$, причем с ростом передаваемой энергии ω величина $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ убывает как $\exp\left(-\frac{\omega-\omega_n}{\xi_0}\right)$. Указанные особенности в поведении $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ процесса (e, e'), обусловленные многоэлектронными эффектами в конечном состоянии, интересно исследовать экспериментально, что послужит проверкой рассматриваемой теории и стимулом для дальнейшего теоретического исследования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mahan G. «Phys. Rev.», 1967, **163**, N 3, 612.
2. Nozieres P., Dominicis C. de. «Phys. Rev.», 1969, **178**, N 3, 1097.
3. Живописцев Ф. А., Комас Ф. Э. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1978, **19**, № 6, 23.
4. Langreth D. «Phys. Rev.», 1970, **B1**, N 2, 471.
5. Живописцев Ф. А., Комас Ф. Э. «Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон.», 1979, **20**, № 2, 25.
6. Mahan G. «Phys. Rev.», 1975, B11, N 12, 4814.

НИИЯФ

Поступила в редакцию
22.07.77

УДК 539.28

А. И. ТЕРЕНТЬЕВСКИЙ, В. Н. ЛАЗУКИН

РАСЧЕТ ЭПР-СПЕКТРОВ ЭЛЕМЕНТОВ ГРУППЫ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЯ С ТОЧНОСТЬЮ ДО ВЕЛИЧИН ВТОРОГО ПОРЯДКА (II)

В предыдущей работе [2] получены диагонализированные спин-гамильтонианы, позволяющие описывать практически все экспериментально наблюдаемые угловые спектры ЭПР.

Использование формализма спин-гамильтониана не совсем точно учитывает реальную ситуацию, в которой находится примесный ион. Тем не менее многие результаты теоретического анализа, основанного на указанном формализме, носят достаточно общий характер и являются не только полезными, но порой единственно возможными способами описания экспериментальных результатов и понимания их смысла.

Элемент неточности возникает и при использовании теории возмущения для численного решения спин-гамильтонианов. И тем не менее в большинстве случаев хорошее совпадение теории с результатами экспериментов получается при вычислении собственных значений с точностью до поправок второго порядка. Именно с такой точностью и вычислены собственные значения спин-гамильтонианов, полученных в предыдущей работе [2]. Последнее обстоятельство позволяет, в свою очередь, получить аналитические выражения, пригодные для непосредственного описания результатов угловых ЭПР-экспериментов как разрешенных, так и запрещенных спектров ионов группы железа в произвольных решетках.

§ 1. Собственные значения спин-гамильтониана. Задачу нахождения собственных значений спин-гамильтониана для различных видов симметрии (см. формулы (10), (12), (14), (16), (18) в [2]) будем решать исходя из неравенства

$$g\beta HM \gg \Sigma B_L^M O_L^M, \tag{1}$$

поскольку в этом случае применима теория возмущений. Полное значение энергии в спиновых переменных запишется в виде суммы [1]

$$E_M = E_M^{(0)} + E_M^{(1)} + E_M^{(2)} + \dots . \tag{2}$$

В подавляющем большинстве случаев необходимой точности величины E_M можно достигнуть, ограничиваясь поправкой 2-го порядка. Члены