

УДК 539.292.011:535.34

Ф. А. ЖИВОПИСЦЕВ, Ф. Э. КОМАС (Куба)

ОБ ОБОБЩЕНИИ ТЕОРИИ НОЗЬЕРА — ДЕ ДОМИНИСИСА РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ У КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ В МЕТАЛЛАХ НА СЛУЧАЙ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ

1. В последнее время особый интерес приобрело изучение мягких рентгеновских спектров у края поглощения (эмиссии) в металлах. В работе Нозьера — де Доминисиса [1] (НД) было найдено выражение для интенсивности излучения у края поглощения (эмиссии), которое имеет вид

$$I(\varepsilon) \sim (\varepsilon)^{-\alpha_l}, \text{ где } \alpha_l = \frac{2\delta_l}{\pi} - 2 \sum_{l'} (2l' + 1) \left(\frac{\delta_{l'}}{\pi} \right)^2. \quad (1)$$

В выражении (1) энергия порога соответствует $\varepsilon=0$; δ_l — фазовые сдвиги рассеяния электронов проводимости вблизи ферми-поверхности внутренней дырки.

Результат НД был получен на основе простой модели металла, где учитывается одна простая зона проводимости параболического вида и атомный «внутренний» уровень, который освобождается (заполняется) в процессе поглощения (эмиссии). Время жизни и масса внутренней дырки полагаются бесконечными. Пренебрегается взаимодействием между электронами проводимости и не учитываются другие усложнения процесса поглощения (эмиссии), например, межзонные и нерадиационные переходы. Температура системы считается нулевой.

В последнее время появился ряд работ, в которых обсуждалось некоторое расхождение теории НД с экспериментом [2] в детальном описании подробностей рентгеновских спектров металлов. Однако теория НД хорошо описывает спектры фотоэмиссии [3, 4] и в общем неплохо воспроизводит основные спектральные особенности в области края спектров [5]. Очевидно, для более подробного сопоставления результатов теории НД с экспериментом необходимо учесть ряд дополнительных эффектов (как, например, эффекты зонной структуры [6, 7, 8]), в то время как в теории рассматриваются важные многочастичные эффекты, т. е. эффекты внезапного возбуждения неограниченного количества электронно-дырочных пар в зоне проводимости металла.

В настоящей работе рассмотрен вопрос обобщения теории НД на случай конечной температуры, причем обсуждается лишь процесс поглощения.

В работе Феррела [9] была рассмотрена зависимость от температуры рентгеновских спектров, но Феррел не провел последовательной перестройки теории НД при конечных температурах и не обсудил вопрос о температурном уширении спектров. Кроме того, в указанной работе проблема решается в предположении о малости константы связи между внутренней дыркой и электронами проводимости (как известно, в теории НД нет такого предположения).

В нашей работе проводится систематическая перестройка теории НД с помощью метода уравнения движения для временных гриновских

функций при конечной температуре и произвольном значении константы связи между электронами проводимости и внутренней дыркой. Рассматривается температура до ≈ 300 К. С учетом малости тепловой энергии решаются уравнения для функции Грина до членов порядка T^2 , что приводит к уширению спектров в форме гауссовской функции. Мы изучаем механизм уширения, обусловленный тепловыми возбуждениями электронов проводимости. В заключении работы обсуждаются другие возможные механизмы уширения спектров.

2. Предположим, что в момент времени t_0 имеет место внезапное появление внутренней дырки. Пусть $t_0 \leq \tau \leq t$. Двухчастичная функция Грина определяется выражением

$$iF_{kk'}(\tau, \tau_0; t_0, t) = \langle \langle T_i \{ \tilde{a}_k(\tau) \tilde{a}_k^+(\tau_0) \tilde{b}(t_0) \tilde{b}^+(t) \} \rangle \rangle, \quad (2)$$

где усреднение проводится согласно известным правилам теории температурных гриновских функций.

Модельный гамильтониан H имеет вид [1]:

$$H = \sum_k \epsilon_k a_k^+ a_k + \epsilon_0 b^+ b + \sum_{kk'} V_{kk'} a_k^+ a_k b b^+, \quad (3)$$

где a_k — оператор уничтожения электрона проводимости, b — оператор уничтожения внутреннего электрона, $V_{kk'}$ — взаимодействие между внутренней дыркой и электронами проводимости. $V_{kk'}$ выбирается в виде [1]:

$$V_{kk'} = -V u_k u_{k'}, \quad V > 0, \quad (4)$$

где

$$u_k = \begin{cases} 1, & |\epsilon_k - \mu| < \xi, \\ 0, & |\epsilon_k - \mu| > \xi. \end{cases}$$

Шпур в определении $F_{kk'}$ состоит из суммы по состояниям, которые не содержат дырку на внутреннем уровне. Нетрудно показать, что

$$F_{kk'}(\tau, \tau_0; t, t_0) = i\varphi_{kk'}(\tau, \tau_0) g(t_0, t), \quad (5)$$

где

$$ig(t_0, t) = \langle \langle T_i \{ \tilde{b}(t_0) \tilde{b}^+(t) \} \rangle \rangle \quad (6)$$

— функция Грина внутреннего электрона,

$$i\varphi(\tau, \tau_0) = \langle \langle T_i \{ \tilde{a}_k(\tau) \tilde{a}_k^+(\tau_0) \} \rangle \rangle' \quad (7)$$

— функция Грина электрона проводимости. Усреднение в выражении (7) содержит лишь состояния с внутренней дыркой.

Наша задача состоит в нахождении уравнений движения для $g(t)$ и $\varphi_{kk'}(\tau, \tau_0)$. В данном случае уравнения движения существенно упрощаются благодаря расщеплению обычной цепочки уравнений для гриновских функций. (Такое же расщепление имеет место и при $T=0$).

После несложных преобразований приходим к следующему интегральному уравнению для $\varphi(\tau, \tau_0)$:

$$\varphi(\tau, \tau_0) = G_0(\tau, \tau_0) - V \int_{t_0}^{\tau} G_0(\tau, \tau_1) \varphi(\tau_1, \tau_0) d\tau_1, \quad (8)$$

где

$$\varphi(\tau, \tau_0) = \sum_{kk'} u_k u_{k'} \varphi_{kk'}(\tau, \tau_0).$$

Одночастичная функция Грина свободных электронов имеет вид

$$iG_0(\tau) = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon v(\varepsilon) u^2(\varepsilon) \exp[-i(\varepsilon - \mu)\tau] [1 - n(\varepsilon)]; & \tau > 0; \\ - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon v(\varepsilon) u^2(\varepsilon) \exp[-i(\varepsilon - \mu)\tau] n(\varepsilon); & \tau < 0, \end{cases}$$

где $v(\varepsilon)$ — плотность состояний, $u(\varepsilon)$ — функция обрезания, входящая в (4), которую мы выбрали в виде [1]:

$$\exp\left[-\frac{|\varepsilon - \mu|}{2\xi}\right];$$

$$n(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{T}\right) + 1\right]^{-1}.$$

Нас интересует асимптотическая структура $G_0(\tau)$ при $\tau \gg \xi^{-1}$, причем обычно феноменологический параметр ξ выбирается в виде $\xi \sim \mu$. Кроме того, в изучении процесса поглощения естественно предполагать, что время τ имеет верхний предел порядка Δ^{-1} , где Δ — ширина внутреннего уровня, обусловленная нерезонансными переходами. По данным Баера и др. [10], $\Delta \sim 0,04$ эВ в литии. На основе вышесказанного, можно предположить, что $T\tau \ll 1$ для температур в рассматриваемом интервале (т. е. примерно до 300 K). Итак, получим

$$G_0(\tau) \simeq -\frac{v}{\tau} \left[1 - \frac{1}{6}(\pi T\tau)^2 + \frac{7}{360}(\pi T\tau)^4\right] \approx -\frac{v}{\tau} \exp[-\gamma\tau^2], \quad (10)$$

где $v = v(\mu)$, $\gamma = (1/6)(\pi T)^2$ — параметр малости в нашей теории. Как показано в работе НД [1], для того чтобы получить правильное асимптотическое уравнение для $\Phi(\tau, \tau_0)$, вместо выражения (10) необходимо подставить

$$G_0(\tau) \approx -v \left[P\left(\frac{1}{\tau}\right) \exp(-\gamma\tau^2) + \pi \operatorname{tg} \theta \cdot \delta(\tau) \right], \quad (11)$$

где

$$\pi v \operatorname{tg} \theta = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \cdot v(\varepsilon) u^2(\varepsilon) P\left(\frac{1}{\varepsilon - \mu}\right).$$

Подставляя (11) в (8), получим

$$\Phi_\gamma(\tau, \tau_0) = f_\gamma(\tau, \tau_0) + \frac{\operatorname{tg} \delta}{\pi} \int_{\tau_0}^{\tau} P\left(\frac{1}{\tau - \tau_1}\right) \exp[-\gamma(\tau - \tau_1)^2] \Phi_\gamma(\tau_1, \tau_0) d\tau_1, \quad (12)$$

где

$$f_\gamma(\tau, \tau_0) = \frac{-v}{1 - \pi v \operatorname{tg} \theta} \left\{ P\left(\frac{1}{\tau - \tau_0}\right) \exp[-\gamma(\tau - \tau_0)^2] + \pi \operatorname{tg} \theta \delta(\tau, \tau_0) \right\}, \quad (13)$$

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\pi v V}{1 - \pi v V \operatorname{tg} \theta},$$

$\delta = \delta(\mu)$ — фазовый сдвиг для рассеяния электронов проводимости внутренней дыркой при $\varepsilon = \mu$ и $l = 0$. Уравнение (13) переходит к уравнению НД [1] при $\gamma = 0$.

Тогда функция $\varphi_0(\tau, \tau_0)$ имеет вид

$$\varphi_0(\tau, \tau_0) = -\frac{v}{\beta} \left[\frac{t-\tau}{t-\tau_0} \cdot \frac{\tau_0-t_0}{\tau-t_0} \right]^{\delta/\pi} \left\{ P \left(\frac{1}{\tau-\tau_0} \right) + \pi \operatorname{tg} \theta' \delta (\tau-\tau_0) \right\}, \quad (14)$$

где

$$\beta = 1 - 2\pi v V \operatorname{tg} \theta + \left(\frac{\pi v V}{\cos \theta} \right)^2;$$

$$\operatorname{tg} \theta' = \operatorname{tg} \theta - \frac{\pi v V}{\cos^2 \theta}.$$

Так как при получении уравнения (12) мы ограничились приближением малых значений γ , то нет необходимости точного решения данного уравнения. Решение (12) мы ищем в виде

$$\varphi_\gamma(\tau, \tau_0) \approx \varphi_0(\tau, \tau_0) + \gamma \left[\frac{\partial \varphi_\gamma(\tau, \tau_0)}{\partial \gamma} \right]_{\gamma=0}. \quad (15)$$

Пусть

$$\chi(\tau, \tau_0) = \left[\frac{\partial \varphi_\gamma(\tau, \tau_0)}{\partial \gamma} \right]_{\gamma=0}.$$

Нетрудно показать, что χ удовлетворяет следующему уравнению:

$$\chi(\tau, \tau_0) = \psi(\tau, \tau_0) + \frac{\operatorname{tg} \delta}{\pi} \int_{t_0}^t P \left(\frac{1}{\tau-\tau_1} \right) \chi(\tau_1, \tau_0) d\tau_1, \quad (16)$$

где

$$\psi(\tau, \tau_0) = \frac{v}{\beta \cos \delta} \left(\frac{t-\tau_0}{\tau_0-t_0} \right)^{\delta/\pi} \left[(\tau-\tau_0) - \frac{\delta}{\pi} (t-t_0) \right].$$

Решение уравнения (16) имеет вид

$$\chi(\tau, \tau_0) = \frac{v}{\beta} \left[\frac{t-\tau_0}{\tau_0-t_0} \cdot \frac{\tau-t_0}{t-\tau} \right]^{\delta/\pi} \left[(\tau-\tau_0) - \frac{2\delta}{\pi} (t-t_0) \right]. \quad (17)$$

Подставляя (14) и (17) в (15), найдем $\varphi(\tau, \tau_0)$ с точностью до первого порядка по γ . Итак, получим

$$\varphi_\gamma(\tau, \tau_0) \approx -\frac{v}{\beta} \frac{[i\xi(t-t_0)]^{2\delta/\pi}}{(t-t_0)} \left[1 - \gamma \left(1 - \frac{2\delta}{\pi} \right) (t-t_0)^2 \right]. \quad (18)$$

С учетом малости $\gamma(t-t_0)^2$, удобно переписать (18) в виде

$$\varphi_\gamma(\tau, \tau_0) \approx -\frac{v}{\beta} \frac{[i\xi(t-t_0)]^{2\delta/\pi}}{(t-t_0)} \exp \left[-\gamma \left(1 - \frac{2\delta}{\pi} \right) (t-t_0)^2 \right]. \quad (19)$$

3. При получении выражения для $g(t)$ удобно ввести вспомогательный гамильтониан

$$H_\lambda = \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \varepsilon_0 b^\dagger b + \lambda \sum_k V_{kk} a_k^\dagger a_k b b^\dagger. \quad (20)$$

Нетрудно показать, что

$$\lambda \frac{\partial C_\lambda(t-t_0)}{\partial \lambda} = V \int_{t_0}^t \varphi_\gamma(\tau, \tau^\dagger) d\tau, \quad (21)$$

где

$$\lambda = vV, g_{\lambda}(t) = g_0(t) \exp C_{\lambda}(t),$$

$$g_0(t) = i\Theta(-t) \exp[-i(\varepsilon - \mu)t].$$

Подставляя (19) в (21), получим

$$g(t) = i\Theta(-t) \exp[-i(\varepsilon_0 - \mu)t] [i\xi t]^{-(\delta/\pi)^2} \exp[-\gamma(\delta/\pi)^2 t^2]. \quad (22)$$

4. Подставляя (19) и (22) в (5), получим «приведенную» двух-частичную функцию Грина

$$F(t) = F_0(t) B(t), \quad (23)$$

где

$$F_0(t) = \frac{v}{\beta} \Theta(-t) \frac{[i\xi t]^{\alpha}}{t} \exp[-i(\varepsilon_0 - \mu)t], \quad (24)$$

$$B(t) = \exp[-\gamma(1 - \alpha)t^2], \quad \alpha = \frac{2\delta}{\pi} - \left(\frac{\delta}{\pi}\right)^2. \quad (25)$$

Выражение (24) — результат НД при $T=0$. Функция $B(t)$ учитывает эффект конечности температуры в спектре и приводит к некоторому уширению в спектральных линиях. Фурье-образ $F(t)$ запишем в виде

$$F(\varepsilon) = \int \frac{d\varepsilon'}{2\pi} F_0(\varepsilon - \varepsilon') B(\varepsilon'), \quad (26)$$

где

$$F_0(\varepsilon) = -\frac{v}{\beta} \Gamma(\alpha) \exp(-i\pi\alpha) \left| \frac{\varepsilon}{\varepsilon} \right|^{\alpha}, \quad (27)$$

$$B(\varepsilon) = \frac{(2\pi)^{1/2}}{\sigma} \exp\left[-\frac{\varepsilon^2}{2\sigma^2}\right], \quad (28)$$

$$\sigma = \left[\frac{1 - \alpha}{3} \right]^{1/2} \pi T. \quad (29)$$

5. В заключение можно сделать вывод, что учет температуры состоит в преобразовании бесконечных сингулярных пиков (при $\alpha > 0$) бестемпературной теории в конечные уширенные пики, причем уширение имеет место в форме гауссовской функции (28). При учете членов порядка T^4 получится отклонение от гауссовского уширения, но такое отклонение мало для температур до ~ 300 К. Ввиду малости σ при малых температурах уширение не очень значительно и пики остаются все-

таки острыми. Однако полное уширение спектра осуществляется путем различных механизмов, которые действуют одновременно. В нашей работе рассматривается тепловое возбуждение электронов проводимости металла. Другими авторами [11, 12] было изучено уширение, обусловленное возбуждением фононов. В таблице мы проводим сравнение наших результатов для полуширины уширения с результатами работы [12] в случае лития. Очевидно, фононный вклад в полуширину более значительный, но все-таки необходимо отметить, что теп-

Полуширина уширения для Li, МэВ

T, K	Δ_1	Δ_2	Экс.
4	1	59	90
80	11	64	105
300	42	100	165
400	56	122	120

Δ_1 — температурная полуширина согласно настоящей работе.

Δ_2 — полуширина, включающая фононный вклад (из работы [12]) и температурный вклад. Экспериментальные данные по фотопоглощению также из работы [12].

ловое возбуждение электронов проводимости дает заметный вклад, особенно при высоких температурах (≈ 300 K).

Итак, полученные результаты сближают теоретические и экспериментальные данные. Отметим, что наше выражение для функции Грина атомной дырки $g(t)$ до первого порядка по γ совпадает с результатом, полученным Феррелом для соответствующего порядка. Но наше исследование имеет более общий характер. В работе Феррела не рассматривается функция Грина электронов проводимости, результаты получены в приближении малой константы связи (в то время как в настоящей работе константа связи произвольна) и вопрос об уширении спектров не изучается. Важно еще отметить, что в нашей работе показана возможность перестройки теории НД для конечных температур.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Nozieres P., de Dominicis C. T. Singularities in the X-Ray absorption and emission of metals. III. One body theory exact solution.—Phys. Rev., 1969, 178, N 3, p. 1097—1107.
2. Dow J. D. Theory of X-Ray edges.—Nuovo Cim. B, 1977, 39, N 2, p. 465—468.
3. Doniach S., Sunjic M. Many-electron singularities in X-Ray photoemission and X-Ray line spectra from metals.—J. Phys. C: solid st. phys., 1970, 3, p. 285—291.
4. Hufner S., Wertheim G. K. Core-line asymmetries in the X-Ray photoemission spectra of metals.—Phys. Rev. B, 1975, 11, N 2, p. 678—683.
5. Mahan G. D. Many body effects on X-Ray spectra of metals.—Solid State Phys., 1974, 29, p. 75—138.
6. Gupta R. P., Freeman A. J. Band structure contributions to X-Ray emission and absorption spectra and edges in Mg.—Phys. Rev. Lett., 1976, 36, N 20, p. 1194—1197.
7. Gupta R. P., Freeman A. J. Role of band structure on the X-Ray edge shape in Na metal.—Phys. Lett. A, 1976, 59, N 3, p. 223—225.
8. Gupta R. P., Freeman A. J., Dow J. D. Band theory of K-edge transitions in Li.—Phys. Lett. A, 1976, 59, N 3, p. 226—228.
9. Ferrel R. A. Temperature dependence of the infrared divergence in the degenerate Fermi gas.—Phys. Rev., 1969, 186, N 2, p. 399—401.
10. Baer Y., Citrin P. H., Wertheim G. K. X-Ray photoemission in Li and explanation of its X-Ray edge.—Phys. Rev. Lett., 1976, 37, N 1, p. 49—52.
11. Bergersen B., McMullen T., Carbotte J. Effect of lattice relaxation on the soft X-Ray spectra of metals.—Can. J. Phys., 1971, 49, p. 3155—3165.
12. Heddin L., Rosengren A. On temperature broadening in X-Ray spectra of metals.—J. Phys. F:metal physics, 1977, 7, N 7, p. 1339—1348.

Поступила в редакцию
23.01.79

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1981, т. 22, № 1

УДК 539.171.016

Ф. А. ЖИВОПИСЦЕВ, Х. МОЛИНА (Куба)

ЭФФЕКТ КОРРЕЛЯЦИЙ В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ И УПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ НУКЛОНОВ НА ЯДРАХ

^{16}O и ^{40}Ca

Возможности перехода от задачи об упругом рассеянии в системе многих частиц к одночастичной задаче посвящены многие работы [1—3]. Мнимая часть оптического потенциала обусловлена возможностью неупругих столкновений, а также резонансного образования возбужденного комплекса — промежуточного ядра.

К неупругим процессам нуклона с ядром в области малых энергий относятся столкновения, в результате которых происходят возбуждения