

ОБНАРУЖЕНИЕ ЩЕЛЕЙ В ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ ЛИТИЯ

Ю.А.Кулюпин, А.Ф.Федосенко, В.М.Шаталов¹⁾, А.И.Щуренко

В измеренном впервые спектре электрон-фотонной эмиссии лития обнаружены два ярко выраженных максимума. Установлена их связь с особенностями закона дисперсии электронов в незаполненных зонах. Показана возможность прямой экспериментальной проверки теоретических зонных расчетов.

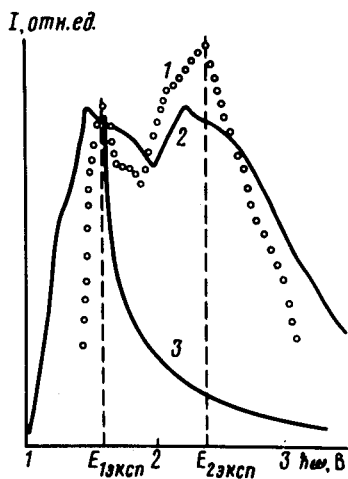
Прямое измерение фурье-компонент псевдопотенциала представляет несомненный интерес для проверки справедливости зонных расчетов и описания гальваномагнитных и оптических свойств металлов. Между тем даже для простых металлов, например, лития, V_{110} в ОЦК фазе неизвестен, ибо в оптических свойствах Li наблюдаются пока не понятые аномалии¹, а при понижении температуры, что необходимо для наблюдения эффекта де Гааза – ван Альфена, литий испытывает мартенситный переход. Поэтому в настоящей работе с целью обнаружения щелей в электронном спектре Li теоретически и экспериментально исследованы спектры электрон-фотонной эмиссии лития. Электрон-фотонная эмиссия (ЭФЭ), т. е. излучение света при бомбардировке металлов медленными электронами²⁻⁴, содержит уникальную информацию об энергетической структуре незаполненных электронных состояний. Этот метод сейчас интенсивно развивается, открывая все новые возможности.

Пленки Li толщиной около 1000 \AA осаждались на сапфировые подложки при комнатной температуре. При скорости испарения $10 - 20 \text{ \AA/мин}$ и давлении остаточных газов $P \approx 5 \cdot 10^{-6} \text{ Па}$ полученные пленки были матовыми. Во время измерения $P \leq 2 \cdot 10^{-7} \text{ Па}$. Пучок электронов с энергией $200 - 300 \text{ эВ}$ и плотностью тока до 70 А/м^2 падал на поверх-

¹⁾ Донецкий физико-технический институт АН УССР.

ность мишени под углом 45° , излучение регистрировалось под углом 15° . Спектры регистрировались в режиме счета фотонов на системе, описанной ранее ^{2, 4}. Время записи спектра составляло около 1 часа.

На рисунке точками показана зависимость числа фотонов N от их энергии E . Спектр неоднократно воспроизводился при допылении лития на поверхность образца после его электронной бомбардировки или после пребывания в течение нескольких суток в атмосфере остаточных газов. Воспроизводимость результатов измерений свидетельствует о том, что заметных изменений характеристик Li , существенных для формирования спектра ЭФЭ не происходит. Это также может служить указанием на объемную природу регистрируемого излучения. Из рисунка (кривая 1) видно, что в спектре ЭФЭ отчетливо наблюдается два максимума и ряд надежно обнаруженных особенностей.



Измеренный (1) и теоретические спектры ЭФЭ лития на основе точного расчета (2) и двухволнового приближения (3)

Для интерпретации обнаруженных особенностей был предпринят псевдопотенциальный расчет зонных энергий и волновых функций. В расчете использовались взятые из "первых принципов" формфакторы псевдопотенциала — Хейне — Абаренкова, локализованные на сфере Ферми ⁶: $V_{110} = 0,10367u$; $V_{200} = 0,06901u$; $V_{211} = 0,01768u$; где $u = (\hbar^2/2m)(2\pi/a)^2$; $a = 6,618$, a_B — постоянная решетки лития. Спектр ЭФЭ, обусловленный прямыми межзонными переходами, имеет вид ²:

$$N(E) \sim \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f,k} |ik | \hat{H}_{rad} |fk \rangle|^2 \delta(\epsilon_{ik} - \epsilon_{fk} - E) \Phi(\epsilon_{ik}) [1 - f_F(\epsilon_{fk})] \rho(E), \quad (1)$$

где $\rho(E)$ — плотность состояний фотонного поля, \hat{H}_{rad} — оператор взаимодействия со светом, $\Phi(\epsilon_{ik})$ — функция распределения неравновесных электронов по энергиям, $f_F(\epsilon)$ — функция Ферми — Дирака. Как и в предыдущих работах ²⁻⁵ мы считали, что функция распределения $\Phi(\epsilon_{ik})$ постоянна и отлична от нуля лишь для нескольких нижайших зон, $i = 1, 2, 3, 4$.

Рассчитанный таким образом с точностью до постоянного множителя спектр ЭФЭ приведен на рисунке (кривая 2). Максимум в спектре при $E_{1теор} = 1,46$ эВ, соответствующий переходам в окрестности точки $N, (2\pi/a) (1/2, 1/2, 0)$ зоны Бриллюэна, был предсказан Гегузиным ⁵. Вид спектра в двухволновом приближении ⁵ с $E_{1эксп} = 1,6$ эВ приведен на рисунке (кривая 3). Отметим, что из-за влияния высоколежащих зон, расчетное значение $E_{1теор}$, существенно отличается от результата двухволнового приближения $2 |V_{110}| = 2,54$ эВ. Максимум вблизи 2,4 эВ отвечает переходам между почти параллельными зонами вдоль направления F зоны Бриллюэна в окрестности точки $(2\pi/a) (2/3, 1/3, 1/3)$. В приближении пустой решетки первые три зоны вырождены в этой точке. Кристаллический потенциал, при учете лишь этих трех зон, приводит к отщеплению третьей зоны на величину $3 |V_{110}| = 3,81$ эВ. Эта щель также существенно уменьшается при

нашем точном расчете до $E_{2\text{теор}} = 2,28$ эВ. При этом соотношение $E_2/E_1 = 3/2$, следующее из приближенного рассмотрения, хорошо выполняется и для точного расчета, и, что особенно важно, для экспериментальных данных. Это означает, что в расчетах различных эффектов по формулам двухволнового приближения можно пользоваться некоторым эффективным формфактором псевдопотенциала, который, как показывают наши измерения, равен $|V_{110}^{\text{eff}}| = 0,8$ эВ. Введение такого эффективного псевдопотенциала обосновано теоретически путем сворачивания секулярного уравнения по теории возмущений Левина.

Щели	Эксп.	Теор	7	8	9	10
$E_1 = E(N_1) - E(N'_1)$, эВ	1,6	1,5	1,5	2,9	2,8	2,9
$E_2 = E(F_1) - E(F_3)$, эВ	2,4	2,3	2,0	—	3,4	0,5

Из рисунка видно, что как форма рассчитанного спектра, так и положение максимумов в нем хорошо согласуются с измеренными. Это означает, что принятая модель адекватно отражает основные черты явления ЭФЭ и потому измеренные спектры могут служить критерием справедливости зонных расчетов. Зонные расчеты для лития проводились неоднократно на протяжении последних десятилетий разными авторами и различными методами. В настоящей работе мы впервые имеем возможность сопоставить результаты некоторых из этих расчетов с прямыми экспериментальными данными. Таблица демонстрирует существенное расхождение между результатами разных авторов. Лучше всего согласуются с нашими измерениями и расчетами результаты Шнейдера и Сталла⁷. Следует подчеркнуть, что наш расчет опирается на формфакторы псевдопотенциала, не содержащие подгоночных параметров. При желании можно было бы путем подбора параметров точно согласовать положение особенностей с экспериментом, как это делается в методе полуэмпирического псевдопотенциала для полупроводников.

Литература

1. Callcott T.A., Arakawa E.T.J. Opt. Soc. Am., 1974, **64**, 839.
2. Борзяк П.Г., Гегузин И.И., Дацюк В.Н., Коновалов И.А., Кулюпин Ю.А., Пилипчак К.Н. ЖЭТФ, 1981, **80**, 1514.
3. Woodruff D.P., Smith N.V., Johnson P.D., Royer W.A. Phys. Rev., 1983, **B26**, 225.
4. Кляп М.П., Крицкий В.А., Кулюпин Ю.А., Кучеренко Ю.Н., Пилипчак К.Н., Поп С.С. ЖЭТФ, 1984, **86**, 1117.
5. Гегузин И.И. ФТТ, 1982, **24**, 2868.
6. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.: Мир. 1968.
7. Шнейдер И., Сталл Е. Вычислительные методы в теории твердого тела, под ред. А.А.Овчинникова, М.: Мир, 1975, стр. 196.
8. Dagens L., Perrot F. Phys. Rev., 1973, **B8**, 1281.
9. Ching W.Y., Callaway J. Phys. Rev., 1974, **B9**, 5115.
10. Farraz A.C., Takahashi E.K., Leite J.R. Solid State Comm., 1982, **44**, 1569.