

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФУРЬЕ-КОМПОНЕНТ ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА ОПТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

А. И. Головашкин, Г. П. Мотулевич

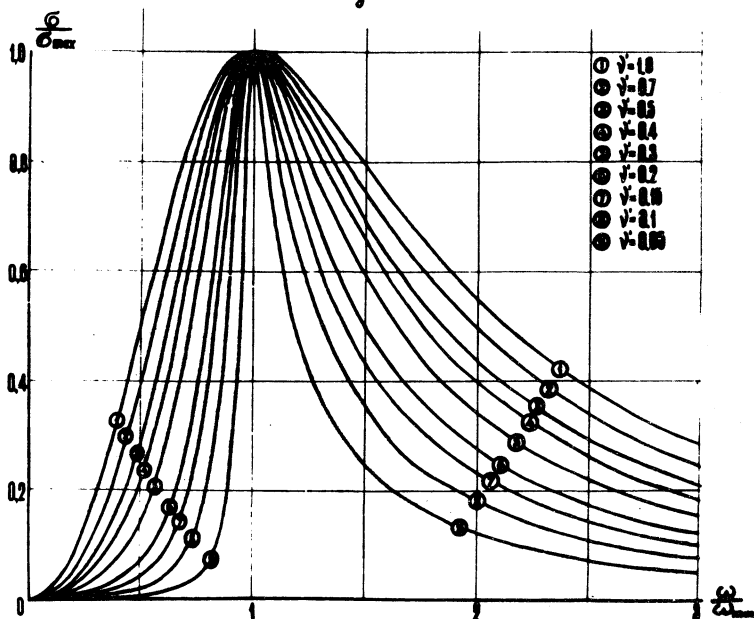
В настоящее время для рассмотрения многих явлений в физике твёрдого тела всё шире используется метод псевдопотенциала<sup>1</sup>. Представляет существенный интерес экспериментальное определение этого потенциала. Существует ряд методов, позволяющих определить фурье-компоненты псевдопотенциала  $V_g$ . Здесь  $g$  - индекс брегговской плоскости. Мы полагаем, что оптический метод является наиболее прямым и, кроме того, пока единственным, позволяющим находить температурную зависимость  $V_g^{2-6}$ . В настоящей работе приводятся значения  $V_g$ , полученные оптическим методом для ряда переходных металлов, а также для переходного металла Nb.

Оптическим путём фурье-компоненты псевдопотенциала находятся по положению максимума  $\omega_{max}$  полос межзонной проводимости  $\sigma$  по формуле

$$|V_g| = \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega_{max}}{\omega'_{max}}. \quad (1)$$

Здесь  $\omega'_{max}$  - безразмерный коэффициент порядка единицы, рассчитанный в<sup>6</sup>, величина которого связана с временем релаксации. Определение проводится по зависимости  $\sigma/\sigma_{max}$  от  $\omega/\omega_{max}$ , приведённой на рис.1. Здесь  $\omega$  - круговая частота света,  $\sigma_{max}$  - значение  $\sigma$  при  $\omega = \omega_{max}$ . Совмещая экспериментальные точки с одним из теоретических кон-

туров, находим величину  $\nu' = \hbar \nu_g / 2 |V_g|$ . Далее по значению  $\nu'$  определяем коэффициент  $\omega'_{max}$ <sup>6</sup>. Таким образом, оптический метод позволяет получить как величину  $V_g$ , так и время релаксации  $\nu_g^{-1}$  для межзонных переходов



Р и с. 1. Зависимость величины  $\sigma/\sigma_{max}$  от  $\omega/\omega_{max}$  для разных значений  $\nu'$ . Цифрами отмечены кривые: 1-  $\nu' = 1,0$ ; 2-  $\nu' = 0,7$ ; 3-  $\nu' = 0,5$ ; 4-  $\nu' = 0,4$ ; 5-  $\nu' = 0,3$ ; 6-  $\nu' = 0,2$ ; 7-  $\nu' = 0,15$ ; 8-  $\nu' = 0,1$ ; 9 -  $\nu' = 0,05$ .

вблизи соответствующей брегговской плоскости. Кроме того, по формулам работы<sup>6</sup> можно определить вклад указанных межзонных переходов  $\epsilon_1(0)$  в диэлектрическую постоянную на частотах  $\omega \ll \omega_{max}$ .

В таблице 1 приведены результаты экспериментального определения величин  $V_g$ ,  $\nu_g$  и  $\epsilon_1(0)$  оптическим методом. Измерения оптических свойств указанных в

Таблица 1

Металл	T, °K	Индекс { $\epsilon$ }	$\nu_g$ , эВ	$\nu_g$ , $10^{14}$ сек $^{-1}$	$\epsilon, (0)$	$\frac{P_g}{P_g^0}$	$S_g$
Pb	4,2	111	0,97	3,2	9	0,698	1
		200	0,64	4,7		0,806	1
	78	111	0,98	4,8	10	0,698	1
		200	0,60	4,6		0,806	1
	293	111	0,96	7,6	15	0,698	1
		200	0,42	5,6		0,806	1
Sn	4,2	101	0,58	2,8	46	0,688	$\sqrt{2}/2$
		220	0,26	1,6		0,931	1
		211	0,16	0,83		0,952	$\sqrt{2}/2$
	78	101	0,56	4,0	50	0,688	$\sqrt{2}/2$
		220 } 211 }	0,25	2,9		-	-
	293	101	0,48	6,1	56	0,688	$\sqrt{2}/2$
		220 } 211 }	0,20	1,3		-	-
Jn	4,2	111	0,65	4,5	45	0,769	1
		2	0,24	2,8		-	1
	295	111	0,53	5,0	40	0,769	1
		2	0,22	2,7		-	1
Al	295	111	0,19	1,6	26	0,768	1
		200	0,70	2,8		0,887	1
Zn	293	000,2	0,48	2,2	30	0,807	1
		110,1	0,71	3,2		0,955	$\sqrt{3}/2$
Nb	4,2	110	1,02	9,2	10	0,667	1
	293	110	0,89	16,2	14	0,667	1

таблице металлов выполнены в работах 2,4,7-11. Влияние процессов релаксации учитывалось нами согласно работе 6. Ранее такой учёт был выполнен менее полно, с чем связано небольшое расхождение в значениях  $V_g$ , приведённых здесь и в работах 2,4-5,10-12. В таблице 1 даны также отношения  $P_g/P_F^0$  ( $P_g$  - расстояние от центра зоны  $\Gamma$  до брегговской плоскости  $\mathcal{E}$  в импульсном пространстве,  $P_F^0$  - импульс Ферми свободных электронов при концентрации равной валентной) и структурные факторы  $S_g$ , отнесённые к одному атому ( $V_g = S_g U_g$ ,  $U_g$  - форм-фактор).

Ошибка определения  $V_g$  составляла от 1-3% для сильных полос, до 8-10% для  $V_g$  слабых полос. Для полос, расположенных в области, где велик вклад электронов проводимости ( $V_{III}$  у Al,  $V_{220}$  и  $V_{211}$  у Sn), ошибка достигала 15-20%.

В Sn должны наблюдаться 4 полосы:  $V_{200}$ ,  $V_{101}$ ,  $V_{220}$  и  $V_{211}$ . В спектральном интервале 0,10-1,33 эв при 4,2°K мы наблюдали лишь 3 полосы<sup>8</sup>. Для их отождествления использованы результаты работ<sup>13-14</sup>. Полоса  $V_{200}$ , соответствующая  $P_g/P_F^0 = 0,659$  и  $S_g = 1$ , по-видимому, должна наблюдаться при  $\hbar\omega \approx 3$  эв, где измерения не проводились.

В In в области  $0,12 \leq \hbar\omega \leq 2,25$  эв мы обнаружили лишь две полосы<sup>2</sup>. Отождествление низкочастотной полосы (в таблице 1 она обозначена индексом 2) с  $V_{002}$  ( $P_g/P_F^0 = 0,844$ ) или  $V_{200}$  ( $P_g/P_F^0 = 0,909$ ) пока не однозначно. Если исходить из результатов работ 15-18, то  $V_2 = V_{002}$ . Исходя из интенсивности наблюдаемой полосы и числа физически эквивалентных брегговских плоскостей, скорее можно было бы ожидать, что  $V_2 = V_{200}$ .

В Zn, помимо указанных в таблице 1 полос, должна наблюдаться полоса  $V_{110,0}$ , соответствующая  $P_g/P_F^0 = 0,865$  и  $S_g = 0,5$ . В работе<sup>10</sup> сделана оценка положения этой полосы, согласно которой  $|V_{110,0}| \sim 0,3$  эв. В соответствующей области спектра нет достаточно подробных измерений.

Таблица 2

Свинец (Pb)			
$V_{111}, \text{ЭВ}$	$V_{200}, \text{ЭВ}$	Метод определения	Ссылка
- 1,14	- 0,53	де Гааз-ван Альфен	22

Олово (Sn)					
$V_{200}, \text{ЭВ}$	$V_{101}, \text{ЭВ}$	$V_{220}, \text{ЭВ}$	$V_{211}, \text{ЭВ}$	Метод определения	Ссылка
-0,93	-0,53	+0,44 <sub>5</sub>	+0,49	де Гааз-ван Альфен	13
-1,54	-0,57 <sub>9</sub>	+0,40 <sub>9</sub>	+0,19 <sub>2</sub>	Размерный эффект	14,23

Индий (Jn)				
$V_{111}, \text{ЭВ}$	$V_{002}, \text{ЭВ}$	$V_{200}, \text{ЭВ}$	Метод определения	Ссылка
- 0,7617	-0,280	+0,0922	де Гааз-ван Альфен	15
-0,657	-0,274	+0,036	Метод псевдо-потенциала с подгонкой по циклотронному резонансу, эффекту де Гааза-ван Альфена и размерному эффекту	16,18, 24-25

-0,68	-0,42	+0,095	де Гааз-ван Альфен	17
$\pm 0,31$	-0,25	$<0,067$	циклотронный резонанс	16

## Алюминий (Al)

$V_{111}$ , эв	$V_{200}$ , эв	Метод определения	Ссылка
$\pm 0,23$	$\pm 0,72$	эмиссионные рентгеновские спектры	21
+0,243	+0,764	де Гааз-ван Альфен	26

В работе<sup>19</sup> определены фурье-компоненты псевдопотенциала Mg при комнатной температуре. Найдено

$$V_{110,0} = 0,080 \text{ эв } (P_g/P_F^0 = 0,828; S_g = 0,5),$$

$$V_{000,2} = 0,310 \text{ эв } (P_g/P_F^0 = 0,883; S_g = 1),$$

$$V_{110,1} = 0,365 \text{ эв } (P_g/P_F^0 = 0,938; S_g = \sqrt{3}/2).$$

Поскольку авторы не вычитали вклад электронов проводимости, а также не учитывали влияние релаксации, их данные не включены в таблицу 1.

В Nb наблюдается вторая полоса<sup>20</sup>  $V_{200}$  ( $P_g/P_F^0 = 0,943$ ,  $S_g = 1$ ) в области  $\hbar\omega \approx 4$  эв. Это соответствует  $V_{200} \sim 1,6$  эв. Однако, измерения в<sup>20</sup> выполнены на механически полированных образцах, поэтому результаты не включены в таблицу 1.

В таблице 2 приводятся экспериментальные значения фурье-компонент псевдопотенциала, полученные другими методами. Определение  $V_g$  во всех работах, кроме<sup>21</sup>, проводилось при гелиевых температурах, в работе<sup>21</sup> при комнатной температуре. Сравнение результатов, полученных оптическим методом, с результатами, полученными другими методами, показывает хорошее согласие.

Из таблицы 1 следует, что величины  $V_g$  во всех металлах составляют  $10^{14} - 10^{15}$  сек<sup>-1</sup>. Столь малое время релаксации связано, по-видимому с тем, что в межзонных переходах сильно межэлектронное взаимодействие. Из таблицы видно также, что вклад виртуальных брегговских межзонных переходов в  $\epsilon$ , на низких частотах составляет в металлах 10-100. Это нужно учитывать, особенно в тех случаях, когда время релаксации для электронов проводимости мало.

Поступила в редакцию  
16 января 1970 г.

#### Л и т е р а т у р а

1. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. Изд. "Мир", М., 1968 г.
2. Головашкин А. И., Левченко И. С., Мотулевич Г. П., Шубин А. А. ЖЭТФ 51, 1622 (1966); Препринт ФИАН, 1966 г.
3. Harrison W.A. Phys. Rev. 147, 467 (1966).
4. Головашкин А. И., Мотулевич Г. П. ЖЭТФ 53, 1526 (1967); Препринт ФИАН № 113, 1967 г.
5. Головашкин А. И., Копелиович А. И., Мотулевич Г. П. Письма ЖЭТФ 6, 651 (1967); ЖЭТФ 53, 2053 (1967); Препринт ФИАН № 88, 1967 г.
6. Головашкин А. И., Мотулевич Г. П. ЖЭТФ 57, 1058 (1969); Препринт ФИАН № 76, 1969 г.
7. Головашкин А. И., Мотулевич Г. П., Шубин А. А. ЖЭТФ 38, 51 (1960); Шкляревский И. Н., Яровая Р. Г. Оптика и спектроскопия 16, 85 (1964).

8. Головашкин А. И., Мотулевич Г. П. ЖЭТФ 47, 64 (1964); Головашкин А. И. Труды ФИАН 39, 91 (1967).
9. Lettington A.H. Proc. of the 1-st Intern.Coll. on Optical Prop. and Electronic Structure of Metals and Alloys, Paris, 1965. Ed. Abelés F., North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1966, p.147.
10. Мотулевич Г. П., Шубин А. А. ЖЭТФ 56, 45 (1969); Препринт ФИАН № 151, 1968 г.
11. Головашкин А. И., Лексина И. Е., Мотулевич Г. П., Шубин А. А. ЖЭТФ 56, 51 (1969); Препринт ФИАН № 181, 1968 г.
12. Мотулевич Г. П. УФН 97, 211 (1969).
13. Staflen M.D., de Vroomen A.R. Phys.Stat.Sol. 23, 683 (1967).
14. Weisz G. Phys. Rev. 149, 504 (1966).
15. Hughes A.J., Shepherd J.P.G. J.Phys. C 2, 661 (1969).
16. Мина Р. Т., Хайкин М. С. ЖЭТФ 51, 62 (1966).
17. O'Sullivan W.J., Schirber J.E., Anderson J.K. Solid State Commun. 5, 525 (1967).
18. Ashcroft N.W., Lawrence W.E. Phys. Rev. 175, 938 (1968).
19. Jones D., Lettington A.H. Proc.Phys.Soc. 92, 948 (1967).
20. Кириллова М. М., Чариков Б. А. ФММ 19, 495 (1965).
21. Rooke G.A. J.Phys. C 1, 776 (1968).
22. Anderson J.R., Gold A.V. Phys. Rev. 139, A 1459 (1965).
23. Гантмахер В. Ф. ЖЭТФ 44, 811 (1963); 46, 2028 (1964).
24. Brandt G.B., Rayne J.A. Phys.Letters 12, 87 (1964); Phys. Rev. 132, 1512 (1963).
25. Гантмахер В. Ф., Крылов И. П. ЖЭТФ 49, 1054 (1965).
26. Ashcroft N.W. Phil. Mag. 8, 2055 (1963).