Краткие сообщения по физике № 2 - 1984 г.

МОДЕЛЬ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ И МЕЖЗОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МЕТАЛЛАХ С УЧЕТОМ ГИБРИДИЗИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ

А. И. Головашкин, Т. И. Кузнецова

УДК 535.343.2

Рассмотрено влияние гибридизации локализованных и почти свободных электронов на форму полос поглощения, связанных с межзонными переходами в металлах. Выявлено расщепление полос поглощения.

Для анализа спектров поглощения металлов и извлечения из них данных по электронным характеристикам вещества необходима модель, описывающая межзонные переходы. Такая модель подробно разработана в /I/ применительно к случаю непереходных металлов; она основана на представлении о почти свободных электронах. В данной работе построена упрощенная модель, учитывающая гибридизацию локализованных и почти свободных электронов. Цель работы - найти особенности спектров, которые могли бы проявляться в переходных металлах.

Мы предполагали, что на свободные электроны в металле действуют периодический потенциал $w(\vec{r}) = 2W\cos\vec{G}\vec{r}$. Кроме того, предполагалось наличие параметра гибридизации $\Delta_{\vec{k}}$, связывающего свободную волну ($\vec{k}$ - волновой вектор) и локализованное состояние. В такой системе зависимость энергии от импульса $\vec{k}\hbar$ для нижней зоны имеет вид

$$E_{\vec{k}}^{(sd)} = (E_{\vec{k}}^{(s)} + E^{(d)})/2 + \sqrt{(E_{\vec{k}}^{(s)} - E^{(d)})^2/4 + \Delta_{\vec{k}}^2},$$

$$E_{\vec{k}}^{(ds)} = (E_{\vec{k}}^{(s)} + E^{(d)})/2 - \sqrt{(E_{\vec{k}}^{(s)} - E^{(d)})^2/4 + \Delta_{\vec{k}}^2}.$$

Здесь $E^{(d)}$ – энергия локализованного состояния, $E^{(s)}_{\vec{k}}$ дается формулой

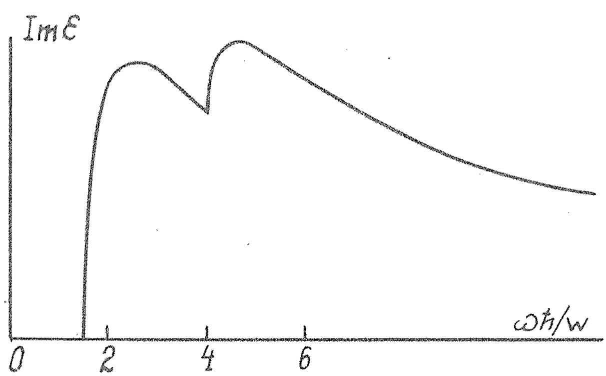
$$E^{(s)}_{\vec{k}} = (E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}-\vec{G}})/2 - \sqrt{(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{G}})^2/4 + W^2},$$

а $E_{\vec{k}} = \vec{k}^2\hbar^2/2m$ – энергия свободного электрона. Гибридизацией состояний верхней зоны с локализованными состояниями мы пренебрегаем (используя условия $|\Delta_{\vec{k}}| \ll W$, $E^{(d)} < E_{\vec{G}}$), поэтому для нее зависимость энергии от импульса имеет обычный (см. /2/) вид

$$E^{(p)}_{\vec{k}} = (E_{\vec{k}} + E_{\vec{k}-\vec{G}})/2 + \sqrt{(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{G}})^2/4 + W^2}.$$

Переходы между состояниями нижней зоны (которую мы считаем заполненной вплоть до энергий $E_{\vec{k}} \leqslant E^{(sd)}_{\vec{G}}$) и верхней зоны (незаполненной) дают вклад в мнимую часть диэлектрической проницаемости $\mathrm{Im}\,\varepsilon$, который выражается формулой

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon = \mathrm{const}\int \frac{W}{(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{G}})^2 + W^2}\left\{\frac{\delta(\hbar\omega - E^{(p)}_{\vec{k}} + E^{(sd)}_{\vec{k}})}{1 + \Delta^2_{\vec{k}}/(E^{(sd)}_{\vec{k}} - E^{(d)})^2} + \right.$$
$$\left. + \frac{\delta(\hbar\omega - E^{(p)}_{\vec{k}} + E^{(ds)}_{\vec{k}})}{1 + \Delta^2_{\vec{k}}/(E^{(ds)}_{\vec{k}} - E^{(d)})^2}\right\} d^3k. \qquad (I)$$



Р и с. I. Частотная зависимость коэффициента поглощения

Здесь мы для простоты приняли предположение о том, что локализованные состояния в отсутствие гибридизации вклада в поглощение не дают; ω – частота излучения. Характер зависимости $\operatorname{Im} \varepsilon$ от ω (1) иллюстрируется рис. I. Расчет выполнен при $W/E_{\vec{G}} = 10^{-1}$, $E^{(d)}/E_{\vec{G}} = 0{,}75$, $\Delta_{\vec{K}}/E_{\vec{G}} = 10^{-2}$. Особенностью полученной зависимости, как видно из рис. I, является расщепление полосы поглощения.

Поступила в редакцию
6 июля I983 г.

Литература

I. А. И. Головашкин, Г. П. Мотулевич, ЖЭТФ, 57, I054 (I969).

2. Дж. Займан, Принципы теории твердого тела, "Мир", М., I974 г. с. 99.