

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛОВ И СПЛАВОВ  
ПО ИХ МОДУЛЯЦИОННЫМ ОПТИЧЕСКИМ СПЕКТРАМ В ОБЛАСТИ ПОЛОС  
МЕЖЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

А. И. Головашкин, А. Л. Шелехов

УДК 537.3Г2.62; 535.393

Определение электронных характеристик металлов и сплавов по их термомодуляционным спектрам (ТМС) в случае сложного наложения полос требует применения ЭВМ. В настоящей работе предложен алгоритм и программа расчета электронных характеристик по ТМС в области брегговских переходов при наличии перекрывающихся полос. Определены характеристики сплава  $Nb_3(AlSi)$  и  $Al$ .

1. Модель спектра. ТМС представляет собой частотную зависимость величины  $\beta = (1/R)(dR/dT)$ , где  $R$  - коэффициент отражения света,  $T$  - температура. В области брегговских переходов в  $R$  вносят вклад как электроны проводимости, так и межзонные переходы. Вклад в комплексную диэлектрическую постоянную  $\epsilon^*$  от электронов проводимости для большинства металлов и сплавов можно вычислить по формулам нормального скин-эффекта  $\epsilon_g^* = -4\pi e^2 N / m\omega(\omega - i\nu)$ . Здесь  $N$  - концентрация электронов проводимости,  $\nu$  - частота электронных соударений,  $\omega$  - круговая частота света. Легко учесть слабую аномальность скин-эффекта  $|I|$ .

Вклад от брегговских межзонных переходов  $/2/$

$$\epsilon_b^* = \sum_g \epsilon_g^* = \frac{e^2}{3\pi\hbar^2} \sum_g \frac{n_g p_g}{\omega_g} (J_1 - iJ_2). \quad (I)$$

Здесь  $n_g$  - число брегговских плоскостей с индексом  $g$ ,  $p_g$  - расстояние от центра зоны Бриллюэна до плоскости  $g$ ,  $\omega_g = 2|V_g|/\hbar$ ,  $V_g$  - Фурье-компонента псевдопотенциала. Суммирование ведется по всем системам физически эквивалентных брегговских плоскостей.

тей, пересекающих сферу Ферми свободных электронов. Вычисляя интегралы  $J_1$  и  $J_2$ , найдем

$$J_1 = \frac{\pi}{\sqrt{2B} \sqrt{A + \sqrt{B}}} - \frac{(\omega^*)^2 - (\nu^*)^2}{2\omega^*\nu^*} J_2, \quad (2)$$

$$J_2 = 2\pi\omega^*\nu^* \frac{1 - 2A - \sqrt{B} + \sqrt{2B}\sqrt{A + \sqrt{B}}}{\sqrt{2B}\sqrt{A + \sqrt{B}}(1 - 2A + B)}, \quad (3)$$

где  $A = 1 - (\omega^*)^2 + (\nu^*)^2$ ,  $B = A^2 + 4(\omega^*)^2(\nu^*)^2$ ,  $\omega^* = \omega/\omega_g$ ,  $\nu^* = \nu/\omega_g$ ,  $\nu_g^{-1}$  - электронное время релаксации для брегговских межзонных переходов. При расчете параметров полезно также соотношение /2/

$$N = N_{\text{вал}} - \frac{\pi}{12\pi\hbar^2} \sum_g n_g p_g \omega_g, \quad (4)$$

где  $N_{\text{вал}}$  - концентрация валентных электронов.

ТМС отражает температурную зависимость электронных характеристик. Наибольшая зависимость от  $T$  наблюдается для частот соударений. При этом в металлах  $(1/\nu) d\nu/dT \sim (1 \div 3) \cdot 10^{-3}$  град $^{-1}$ . Для сильных полос поглощения в Pb и Sn  $(1/\nu) d\nu/dT \approx 2 \cdot 10^{-3}$  град $^{-1}$  /2/, что свидетельствует об определяющей роли взаимодействия электронов с фотонами в процессах релаксации при брегговских межзонных переходах. Более слабая зависимость от  $T$  наблюдается для  $N$  (в металлах  $(1/N) dN/dT \sim (2 \div 7) \cdot 10^{-4}$  град $^{-1}$ ). Температурный коэффициент для наиболее существенных  $\nu_g$ , как следует из (4), должен быть еще меньше.

Изложенная модель достаточно хорошо описывает оптические свойства металлов и сплавов /2,3/. Нужно, однако, отметить, что взаимное пересечение брегговских плоскостей в пределах сферы Ферми свободных электронов будет уменьшать  $\epsilon_g'$  из-за понижения комбинированной плотности электронных состояний. Такое уменьшение наблюдается на эксперименте /2/ и в первом приближении может быть учтено введением эффективного значения для числа брегговских плоскостей  $n_{\text{эфф}}^{(g)} = \gamma n_g$ . Для параметра  $\gamma$  справедливо:  $0 < \gamma \leq 1$ .

2. Алгоритм и программа определения электронных характеристик по ТМС. При наличии брегговских межзонных переходов ТМС со-

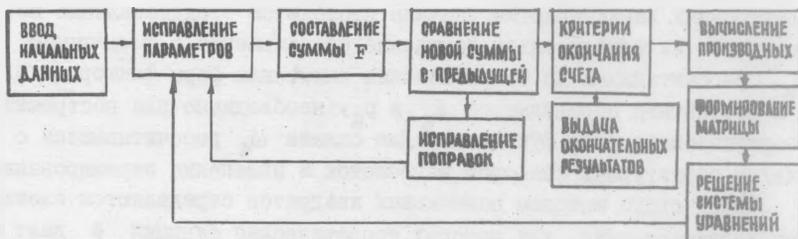
держит несколько полос, каждая из которых соответствует определенному индексу  $g$ . Отдельная полоса имеет характерную форму  $\sqrt{4/}$  с максимумом на частоте примерно равной  $\omega_g$ . Для определения электронных характеристик вначале проводится отождествление полос, т.е. их приближенное положение сравнивается с величинами  $\omega_g$ , рассчитанными по теоретическим значениям форм-факторов  $\sqrt{5/}$ , и в результате определяются  $a_g$  и  $p_g$ , необходимые для построения теоретического вида функции  $\beta$ . Для сплава  $\omega_g$  рассчитываются с учетом структурных факторов подрешеток и изменения экранирования.

После этого методом наименьших квадратов определяются электронные характеристики, для которых теоретическая функция  $\beta$  дает наилучшую аппроксимацию экспериментального ТМС. Сумма квадратов отклонений теоретической функции  $\beta$  от ее экспериментальных значений  $F(a_1, a_2, a_3, \dots, a_k)$  минимизируется способом, описанным в  $\sqrt{6/}$  (здесь  $a_1, a_2, \dots, a_k$  — искомые параметры). При этом методом последовательных приближений решается нормальная система нелинейных уравнений вида:

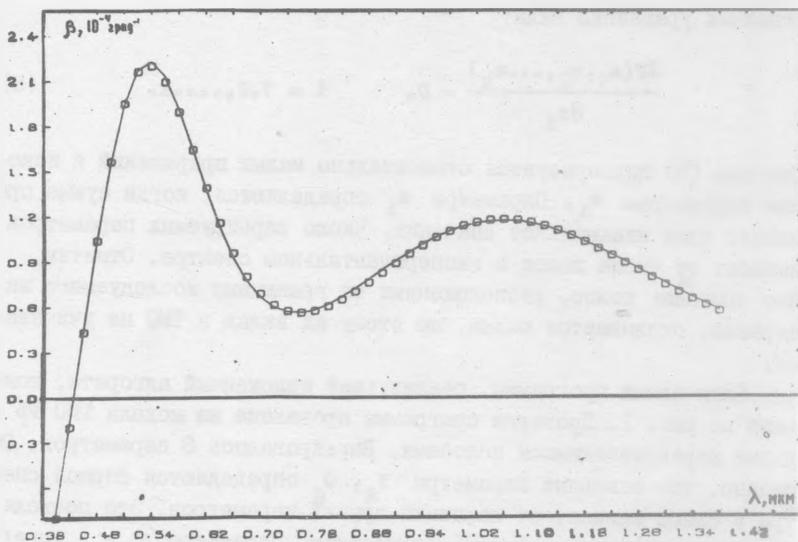
$$\frac{\partial F(a_1, a_2, \dots, a_k)}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (5)$$

Система (5) линеаризуется относительно малых приращений к искомым параметрам  $a_i$ . Параметры  $a_i$  определяются, когда сумма принимает свое минимальное значение. Число варьируемых параметров зависит от числа полос в экспериментальном спектре. Отметим, что влияние полос, расположенных за границами исследуемого интервала, оказывается малым, по этому их вклад в ТМС не учитывался.

Блок-схема программы, реализующей изложенный алгоритм, показана на рис. 1. Проверка программы проведена на модели ТМС  $F\beta$  с двумя перекрывающимися полосами. Варьировалось 8 параметров. Показано, что основные параметры  $V_g, \nu_g$  определяются формой спектра и слабо зависят от вариаций других параметров. Это позволяет определить их с высокой надежностью. Параметры  $\eta$  и  $\gamma$  определяются менее точно, что связано с относительно слабым вкладом в  $\epsilon''$  от электронов проводимости в исследуемой области спектра и противоположным влиянием на отношение вкладов от электронов проводимости и межзонных переходов. Если один из этих парамет-



Р и с. 1. Блок-схема программы расчета электронных характеристик по ТМС



Р и с. 2. Сравнение рассчитанного по программе ТМС (сплошная кривая) с исходными данными (точки) для модельного спектра Р<sub>В</sub>

ров известен, другие находятся с высокой надежностью. Наконец, параметр  $\gamma$  в области брегговских переходов очень слабо влияет на функцию  $\beta$ , поэтому его определение при умеренной точности практически невозможно. Сравнение рассчитанного на ЭВМ спектра с исходным ТМС приведено на рис. 2.

Ошибка определения параметров находилась как величина их отклонения, приводящая к изменению расчетного ТМС на величину экспериментальной ошибки в ТМС. Оказалось, что при экспериментальной ошибке в несколько процентов ошибка расчета  $v_E$  и  $\gamma_E$  составляет доли процента.

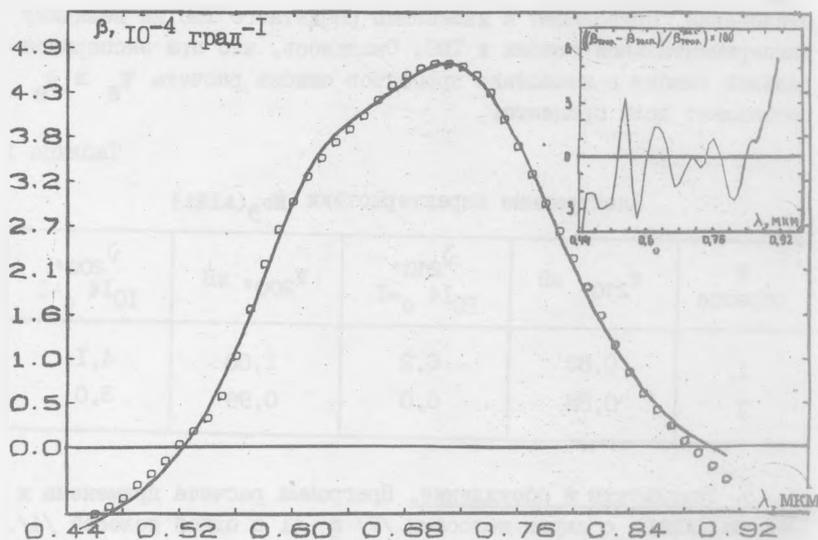
Таблица I

Электронные характеристики  $Nb_3(AlSi)$

№ образца	$v_{210}$ , эВ	$\gamma_{210}$ , $10^{14}$ с <sup>-1</sup>	$v_{200}$ , эВ	$\gamma_{200}$ , $10^{14}$ с <sup>-1</sup>
1	0,83	6,2	1,00	4,1
2	0,88	6,0	0,99	3,0

3. Результаты и обсуждение. Программа расчета применена к ТМС  $Nb_3(AlSi)$  с двумя полосами /7/ и Al с одной полосой /4/. Результаты определения характеристики двух образцов  $Nb_3(AlSi)$  приведены в таблице I. Отметим, что величины  $v_E$  и  $\gamma_E$  достаточно близки к значениям, рассчитанным по положению максимума полосы и ее полуширине, однако не совпадают с ними точно. Сравнение расчетных и экспериментальных ТМС дано на рис. 3. На вставке показано также отклонение  $(\beta_{теор} - \beta_{эксп})/\beta_{эксп}^{max}$  как функция длины волны  $\lambda$ . Видно хорошее согласие спектров в области брегговских переходов. Величины  $\gamma$  составляют от нескольких сотых до нескольких десятых. Концентрация электронов проводимости, найденная без учета соотношения (4), составляла, например,  $1,7 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup> для образца № 1. Это значение следует рассматривать как верхнюю границу. Для Al /4/ найдено  $v_E = 0,8$  эВ,  $\gamma_E \approx 3,9 \cdot 10^{14}$  с<sup>-1</sup>,  $\gamma \approx 0,5$ ,  $N \approx 5 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup>. Отметим, что в Al величина  $\omega_E$  также не совпадает с точным положением максимума полосы, поэто-

му для определения параметров необходимо использовать настоящую программу. При определении характеристик  $\Delta l$  и  $Nb_3(AlSi)$  пренебрегалось вкладом низкочастотных полос. Его можно учесть, зная приближенное положение этих полос.



Р и с. 3. Сравнение экспериментального и теоретического ТМС  $Nb_3(AlSi)$  для образца № I. На вставке дано отклонение теоретического ТМС от экспериментального

Данную программу легко обобщить на случай большего числа полос, а также другую форму спектра. Полученные по ТМС значения параметров в принципе позволяют рассчитать оптические постоянные  $n$  и  $k$  в этой области спектра. Сравнение с экспериментальными значениями  $n$  и  $k$ , измеренными хотя бы в одной или нескольких точках, позволит сделать заключение о точности исходной модели.

Поступила в редакцию  
3 марта 1978 г.

## Л и т е р а т у р а

1. Г. П. Мотулевич, ЖЭТФ 46, 287 (1964); А. И. Головашкин, Г. П. Мотулевич, ЖЭТФ 53, 1526 (1967).
2. А. И. Головашкин, Г. П. Мотулевич, ЖЭТФ 57, 1054 (1969); Краткие сообщения по физике ФИАН, № 2, 69 (1970); препринт ФИАН № 41, 1970 г.
3. Г. П. Мотулевич, А. И. Головашкин, А. А. Шубин, Сб. "Электронная структура переходных металлов, их сплавов и соединений", изд. "Наукова думка", Киев, 1974 г., стр. 311.
4. А. И. Головашкин, К. В. Мицен, Г. П. Мотулевич, ФТТ 14, 1704 (1972).
5. A. O. E. Animalu, V. Heine, *Phil. Mag.* 12, 1249 (1965); У. Харрисон, Псевдопотенциалы в теории металлов, "Мир", М., 1968 г.
6. Т. А. Агекян, Основы теории ошибок для астрономов и физиков. "Наука", М., 1972 г.
7. А. И. Головашкин, Д. Р. Джураев, И. С. Левченко, Г. П. Мотулевич, А. Л. Шелехов, ФТТ 19, 1427 (1977).