

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

А. И. Головашкин, А. Л. Шелехов

УДК 537.312.62; 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 .

I. 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 ϵ^* 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, ν - частота электронных соударений, ω - 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 $A = 1 - (\omega^*)^2 + (\nu^*)^2$, $B = A^2 + 4(\omega^*)^2(\nu^*)^2$, $\omega^* = \omega/\omega_g$, $\nu^* = \nu/\omega_g$, ν_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 $(1/\nu) d\nu/dT \sim (1 \div 3) 10^{-3}$ 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 $(1/N) dN/dT \sim (2 \div 7) 10^{-4}$ град $^{-1}$). Температурный коэффициент для наиболее существенных ν_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 ϵ_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 γ справедливо: $0 < \gamma \leq 1$.

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

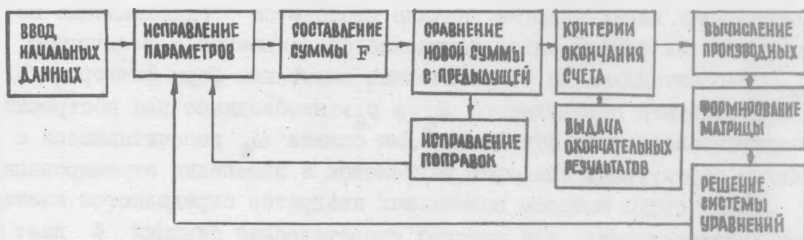
держит несколько полос, каждая из которых соответствует определенному индексу g . Отдельная полоса имеет характерную форму $/4/$ с максимумом на частоте примерно равной ω_g . Для определения электронных характеристик вначале проводится отождествление полос, т.е. их приближенное положение сравнивается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

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

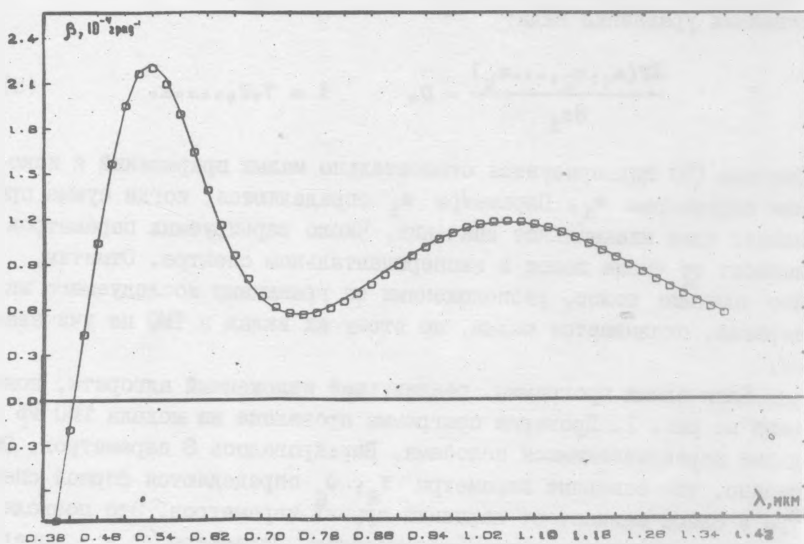
$$\frac{\partial F(a_1, a_2, \dots, a_k)}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k. \quad (5)$$

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, ν_g определяются формой спектра и слабо зависят от вариаций других параметров. Это позволяет определить их с высокой надежностью. Параметры η и γ определяются менее точно, что связано с относительно слабым вкладом в ϵ'' 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 R_b

ров известен, другие находятся с высокой надежностью. Наконец, параметр γ в области брегговских переходов очень слабо влияет на функцию β , 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 γ_E составляет доли процента.

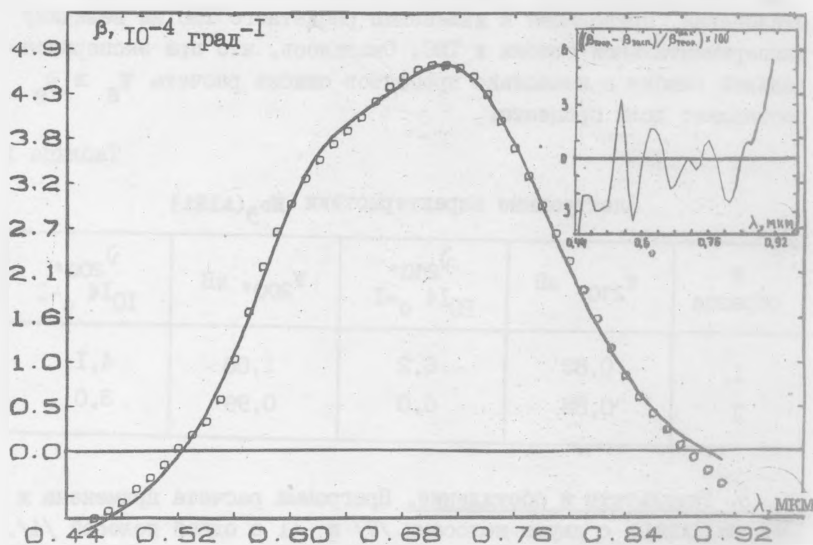
Таблица I

Электронные характеристики $Nb_3(AlSi)$

№ образца	v_{210} , эВ	γ_{210} , 10^{14} с ⁻¹	v_{200} , эВ	γ_{200} , 10^{14} с ⁻¹
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 γ_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 λ . Видно хорошее согласие спектров в области брегговских переходов. Величины γ составляют от нескольких сотых до нескольких десятых. Концентрация электронов проводимости, найденная без учета соотношения (4), составляла, например, $1,7 \cdot 10^{22}$ см⁻³ 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⁻¹, $\gamma \approx 0,5$, $N \approx 5 \cdot 10^{22}$ см⁻³. Отметим, что в Al величина ω_E также не совпадает с точным положением максимума полосы, поэто-

му для определения параметров необходимо использовать настоящую программу. При определении характеристик Δl 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).