

УДК 539.216.2 : 669

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК

Л. Т. Крецишина, Э. Л. Нагаев

Разработана методика расчета плотности электронных уровней в пластинах с учетом их пространственного квантования и возмущения, вносимого поверхностью в параметры гамильтониана. Принципиально новым моментом по сравнению с предыдущими расчетами является учет зонной структуры спектра. Из-за такой структуры поверхностная плотность уровней немонотонно зависит от энергии и чувствительна к кристаллографическим индексам поверхностей пластины. Соответственно поверхностные части энергии Ферми, теплоемкости и восприимчивости немонотонно зависят от концентрации электронов. Обсуждены электронные фазовые переходы при изменении условий на поверхности, которые сопровождаются скачками восприимчивости и теплоемкости. Они возникают, в частности, при пересечении уровнем Ферми того экстремума поверхностной зоны, который лежит внутри объемной зоны.

Как известно, на электронных свойствах тел конечных размеров сильно сказывается квантование электронных уровней. Следует различать две области температур: предельно низких, когда выполнено условие $T \ll \Delta E$, и достаточно высоких, когда это неравенство заменяется противоположным, т. е. $T \gg \Delta E$ (ΔE — характерное расстояние между пространственно-квантованными уровнями). В первом случае существенна сингулярность плотности электронных уровней, порождаемая пространственным квантованием. Связанные с этим эффекты исследованы в многочисленных публикациях [1]. Во втором случае, который только и рассматривается в нашей работе, сингулярности плотности уровней в наблюдаемых величинах сглаживаются. Соответственно можно ввести плотность уровней, усредненную по интервалам энергии δE , таким, что $\Delta E \ll \delta E \ll T$. Следы пространственного квантования здесь проявляются в том, что в первом приближении по $(k_F L)^{-1} \ll 1$ к обычной плотности состояний, пропорциональной объему системы V , добавляется член, пропорциональный площади ее поверхности S (k_F — импульс Ферми, L — толщина пленки). Расчет сглаженной плотности уровней для акустического аналога обсуждаемой системы был проведен еще в начале века Вейлем. Ссылки на него и позднейшие публикации даны в обзоре [2].

При вычислении сглаженной плотности уровней необходимо задавать закон дисперсии для электронов и граничные условия на поверхности для их волновой функции. К настоящему времени эта проблема решена при произвольных граничных условиях лишь для изотропного квадратичного закона дисперсии [2]. Попытка решить ее при произвольном зонном законе дисперсии в частном случае граничных условий Дирихле была предпринята в [3]. Однако полученное там выражение для g_s через контурный интеграл вычислить реально удалось пока только для квадратичного закона дисперсии. Автор [3] считает, что его результаты справедливы не только вблизи экстремумов зон, но и вблизи особенностей ван-Хова.

На основе этих результатов для g_s в [3] получены особенности термодинамических величин, когда уровень Ферми находится вблизи особых точек объемной зоны проводимости в K -пространстве, где под действием давления у поверхности Ферми появляется новая полость. Давление вы-

зывает скачок вторых производных от свободной энергии, т. е. происходит электронный фазовый переход второго рода. Если же уровень Ферми проходит вблизи особенностей ван-Хова, то их аномалии, согласно [3], должны были бы быть еще более сильными. Однако нам представляется, что вблизи особенностей ван-Хова процедура разложения по $1/k_F L$ некорректна. Прямым свидетельством неаналитичности плотности уровней g по $1/k_F L$ является найденная в [3] логарифмическая расходимость g_S в конечной точке, в то время как процедура разложения по $1/k_F L$ предполагает малость g_S по сравнению с g_V .

В нашей работе ставится цель исследовать влияние граничных условий на поверхностные электронные свойства тонких пленок с учетом зонного характера их энергетического спектра. Отказ от трактовки металла как бесконечно глубокой потенциальной ямы приводит к качественно новым результатам для поверхностной плотности состояний: в спектре могут появиться поверхностные зоны или резонансы, из-за которых могут измениться даже знаки поверхностных термодинамических величин по сравнению с полученными в [3].

Учет же зонной структуры спектра позволяет найти электронные характеристики при произвольных значениях энергии, не ограничиваясь областями k -пространства, где справедлив квадратичный закон дисперсии. Кроме того, оказывается возможным выяснить их зависимость от кристаллографических индексов плоскостей, ограничивающих пленку. Но что еще более существенно, он позволяет учесть конечность ширины электронных зон и ограничение, налагаемое из-за этого на g_S (интеграл от нее по зоне должен обращаться в нуль). Как следствие этого ограничения, зависимость ряда поверхностных термодинамических величин (теплоемкости, восприимчивости и т. д.) от электронной концентрации оказывается немонотонной и в общем случае весьма сложной.

Поверхностные электронные зоны можно смещать, изменяя граничные условия на поверхности путем адсорбции на ней различных веществ или приложением внешнего электрического поля. При пересечении уровня Ферми экстремумом поверхностной зоны тогда должны наблюдаться скачки теплоемкости, магнитной восприимчивости и т. д., типа тех, которые, согласно [3], должны возникать под действием давления.

Наконец, в работе исследована зависимость энергии Ферми μ от концентрации электронов и ориентации плоскостей, ограничивающих пленку. Эта зависимость оказывается тоже нетривиальной. Мы хотели бы надеяться, что полученные ниже результаты стимулируют экспериментальные исследования работы выхода электронов из тонких пленок.

1. Плотность уровней в пленке

Излагаемая ниже методика расчета плотности уровней $g(\mathcal{E})$ является обобщением методики, развитой в [4], на случай, когда поверхностные энергетические параметры отличаются от объемных. Она пригодна, когда длина волны квазичастицы λ мала по сравнению с толщиной пленки L , так что величина λ/L служит параметром разложения для $g(\mathcal{E})$. Считается, что простой кубический кристалл имеет форму пластины толщиной $L = (2l+1)a$ по оси z , будучи ограничен плоскостями (001) (a — постоянная решетки). Принимается, что энергетический спектр элементарных возбуждений можно описать в приближении ближайших соседей. Тогда волновое уравнение с учетом возмущения матричных элементов гамильтониана на поверхности можно записать в виде

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{f, \varrho}(E - U) &= B \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta, \varrho} + B (\Psi_{f, \varrho+1} + \Psi_{f, \varrho-1}), \\ &|g| < l - 1, \\ \Psi_{f, \pm(l-1)}(E - U_1) &= B \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta, \pm(l-1)} + B \Psi_{f, \pm(l-2)} + \mathcal{L} \Psi_{f, \pm l}, \\ \Psi_{f, \pm l}(E - U_0) &= B' \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta, \pm l} + \mathcal{L} \Psi_{f, \pm(l-1)}, \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

где f — номер атома в плоскости (001); δ — вектор, нумерующий ближайших соседей атома в плоскости (001); g — номер вдоль оси [001]. После подстановки

$$\Psi_{f, g} = e^{iqf} \begin{cases} \sin p_s g, \\ \cos p_c g, \end{cases} \quad (2)$$

получим следующие трансцендентные уравнения для волновых чисел p_s , p_c

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{ctg} p_s (l-1) &= \frac{-P(p_s) + \cos p_s}{\sin p_s} \equiv R_s, \\ \operatorname{tg} p_c (l-1) &= \frac{P(p_c) - \cos p_c}{\sin p_c} \equiv -R_c, \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

$$\left. \begin{aligned} P &= \left\{ \Lambda - (U_1 - U) - \frac{\mathcal{K}^2}{[\Lambda - (U_0 - U) - 4\Gamma_q (B' - B)]} \right\} B^{-1}, \\ \Lambda &= E - U - 4B\Gamma_q, \\ \Gamma_q &= \frac{1}{2} (\cos q_x + \cos q_y). \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Как правило, технически удобнее разрешить уравнения (3) относительно $\operatorname{ctg} p_s l$ и $\operatorname{tg} p_c l$

$$p_s = \frac{1}{l} \operatorname{arc} \operatorname{ctg} F(p_s) + \frac{\pi n_s}{l}, \quad (5a)$$

$$p_c = \frac{1}{l} \operatorname{arc} \operatorname{tg} F(p_c) + \frac{\pi n_c}{l}, \quad (5б)$$

$$F(p) = \frac{R(p) \operatorname{ctg} p - 1}{R(p) + \operatorname{ctg} p}. \quad (5в)$$

Целые числа n_s и n_c определяются из условия, чтобы p_s и p_c принадлежали интервалу $[0, \pi]$.

Кроме «объемных» мод (2), вообще говоря, возможны и поверхностные моды:

лежащие ниже дна «объемного» спектра

$$\Psi_{f, g} = e^{iqf} \begin{cases} \operatorname{sh} z g, \\ \operatorname{ch} z g, \end{cases} \quad |g| \leq l-1 \quad (6)$$

или выше его потолка

$$\Psi_{f, g} = e^{iqf + i\pi g} \begin{cases} \operatorname{sh} z g, \\ \operatorname{ch} z g, \end{cases} \quad |g| \leq l-1 \quad (7)$$

с точностью до $\sim e^{-2lx}$ спектр энергий поверхностной зоны, согласно (1), (6), (7), находится из уравнений

$$\left. \begin{aligned} \Lambda &= \pm 2B \operatorname{ch} z, \\ P(z) &= \pm e^{-z}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

где верхний знак соответствует (6), а нижний (7).

С учетом (4), (8) плотность уровней (без учета спиновой двойки) дается суммой вкладов от объемной и поверхностной зон

$$\left. \begin{aligned} g(\delta) &= g_V + g_S, \\ g_V &= \sum_{p, q} \delta \{ \delta - 2B (\cos q_x + \cos q_y + \cos p) \}, \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$g_S = 2 \sum_q \delta \{ \delta - 2B (\cos q_x + \cos q_y) \pm \operatorname{ch} z \} \Theta(P^{-2} - 1), \quad (10)$$

где $\Theta(x) = 1$ при $x > 0$ и 0 при $x < 0$, $\delta = E - U$. В (9) производится суммирование по всем p_s и p_c , двойка в (10) — результат равенства вкладов четного и нечетного решений (6), (7) для поверхностных зон в принятом приближении $xl \gg 1$. Подчеркнем во избежание недоразумений, что величина g_V сама может быть представлена как сумма объемного и поверхностного вкладов: именно через нее проявляется влияние поверхности в отсутствие поверхностных зон.

Вычисление g_v и g_s производится с использованием интегрального представления для δ -функции. Оно позволяет разделить суммирование по разным компонентам квазиимпульса. Суммирование по q производится обычным образом путем замены на интегрирование. Это дает возможность сразу получить выражение для $g_s(\varepsilon)$

$$\left. \begin{aligned} g_s(\varepsilon) &= \frac{D^2}{|B|\pi^2 a^2} \Theta(P^{-2} - 1) \mathcal{E} \left(\sqrt{1 - \frac{A^2}{4}} \right), \\ A &= \left| \varepsilon - \frac{P + P^{-1}}{2} \right|, \quad \varepsilon = \frac{\delta}{2B}, \quad \mathcal{E}(\sqrt{x}) \equiv \mathcal{E}(\sqrt{x}) \Theta(x), \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

где \mathcal{E} — полный эллиптический интеграл первого рода, D^2 — площадь (xy) — поверхности пленки. Распределение (11) описывает двумерную зону шириной $8|B|$ с центром в $B(P + P^{-1})$.

Для $g_v(\varepsilon)$ получается выражение

$$\left. \begin{aligned} g_v(\varepsilon) &= \frac{D^2}{4|B|\pi a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{J}_0^2(t) e^{-i\varepsilon t} [G_s(t) + G_c(t)], \\ G_s(t) &= \sum_{P_s} f(p_s, t), \quad G_c(t) = \sum_{P_c} f(p_c, t), \quad f(p, t) = e^{-it \cos p}, \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

где \mathcal{J}_0 — функция Бесселя. Величина $G(t)$ вычисляется при помощи формулы Эйлера—Маклорена, позволяющей автоматически разделить объемную и поверхностную части плотности состояний g_v . В первом порядке по λ/L она представляется в виде

$$G(t) \simeq \int_{n_{\min}}^{n_{\max}} dn f(p(n), t) + \frac{1}{2} \{f[p(n_{\min}), t] + f[p(n_{\max}), t]\}. \quad (13)$$

Интеграл в правой части (13) преобразуется следующим образом

$$\begin{aligned} \int_{n_{\min}}^{n_{\max}} dn f(n) &= \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} \left(\frac{dn}{dp} \right) f(p) dp \simeq \int_0^{\pi} \left(\frac{dn}{dp} \right) f(p) dp - \\ &- (\pi - p_{\max}) \frac{dn}{dp} f(p) \Big|_{\pi} - p_{\min} \frac{dn}{dp} f(p) \Big|_0. \end{aligned} \quad (14)$$

С учетом (3) из (12), (14) получается

$$g_v(\varepsilon) = g_0(\varepsilon) + g_1(\varepsilon), \quad (15)$$

где член g_0 имеет ту же структуру, что и в кристалле неограниченных размеров

$$g_0 = \frac{D^2 L}{4\pi |B| a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{J}_0^2(t) e^{-i\varepsilon t}, \quad (16)$$

а величина g_1 определяется граничными условиями на поверхности

$$\begin{aligned} g_1 &= -\frac{a}{L} g_0 + \frac{D^2}{2|B|\pi^2 a^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \mathcal{J}_0^2(t) \int_0^{\pi} \frac{dF}{dp} \frac{dp e^{-i\varepsilon t(\varepsilon + \cos p)}}{1 + F^2(p)} + \\ &+ \frac{D^2}{2\pi^2 |B| a^2} \sum_{i=s, c} \left\{ \left(\frac{1}{2} - \frac{l}{\pi} p_{\min}^i \right) \mathcal{E} \left\{ \left[1 - \frac{1}{4} (1 - \varepsilon)^2 \right]^{1/2} \right\} + \right. \\ &\left. + \left(\frac{1}{2} - \frac{l}{\pi} (\pi - p_{\max}^i) \right) \mathcal{E} \left\{ \left[1 - \frac{1}{4} (1 + \varepsilon)^2 \right]^{1/2} \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

где p_{\min}^i и p_{\max}^i — минимальное и максимальные значения волновых векторов из интервала $[0, \pi]$, находимые решением уравнения (5). Считается, что дну объемной зоны соответствует волновой вектор $p=0$, а ее потолку $p=\pi$. Таким образом, если g_s (11) отлична от нуля, вклад поверхности в физические величины определяется частью плотности состояний

$$\delta g(\varepsilon) = g_s(\varepsilon) + g_l(\varepsilon). \quad (18)$$

2. Частные случаи

Конкретизируем полученные выше результаты для ряда важных случаев. Сначала будем считать, что поверхность вносит возмущение только в значение атомной энергии U , т. е. что в (1) $U_0 \neq U$, а $U_1 = U$ и $\mathcal{H} = B' = B$. Тогда величина F (5в) дается выражением

$$F(p) = \frac{2v - \cos p}{\sin p}, \quad v = \frac{U_0 - U}{2B}. \quad (19)$$

Определим теперь максимальное p_{\max} и минимальное p_{\min} дозволённые значения p в интервале $[0, \pi]$: при всех v

$$p_s^{\min} = \frac{\pi}{l}, \quad p_s^{\max} = \pi - \frac{\pi}{l}, \quad (20)$$

$$p_c^{\min} = \frac{\pi}{2l}, \quad p_c^{\max} = \pi - \frac{\pi}{2l}. \quad (21)$$

Пользуясь выражениями (19)—(21), нетрудно убедиться, что при $v=0$ второй член в (17) вдвое превышает первый, и тогда полученный здесь

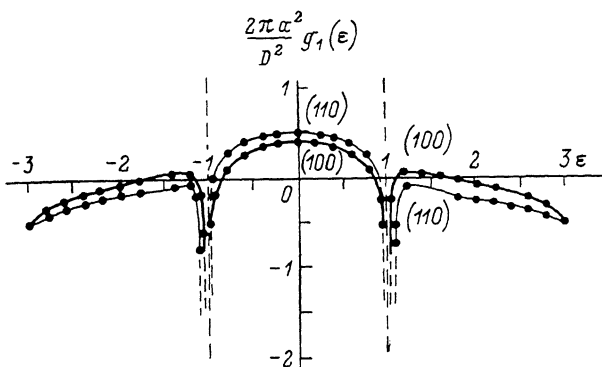


Рис. 1. Плотности уровней в пленках, ограниченных плоскостями (100) или (110), при $v=0$.

результат для частного случая $v=0$ совпадает с найденным в [4]. Как видно из рис. 1, где представлены результаты численного расчета $g_1(\varepsilon)$ при $v=0$, эта величина обращается в $(-\infty)$ в точках $\varepsilon = \pm 1$, где объемная плотность уровней g_0 (16) обнаруживает особенности ван-Хова. Очевидно, это артефакт, проистекающий из невозможности разделения плотности состояний на объемную и поверхностную части в особых точках спектра (обращение в $(-\infty)$ g_1 влечет за собой отрицательность полной $g(\varepsilon)$ (9), что бессмысленно). Как показано в [4], интервалы энергий, где чувствуется влияние особенностей ван-Хова, экспоненциально узки. Следует иметь в виду, что использованная здесь методика не годится и при $|\varepsilon| \rightarrow 3$.

При критическом значении $2|v|=1$, начиная с которого в спектре появляется двукратно вырожденная поверхностная зона, величина dn/dp в (14) в зависимости от знака v становится дельтаобразной при $p=0$ и $p=\pi$. Это дает возможность провести в (17) интеграцию до конца

$$\varepsilon_1 = \frac{D^2}{4|B|\pi^2 a^2} \left\{ \mathcal{K} \left(\sqrt{1 - \frac{(\varepsilon - 1)^2}{4}} \right) - \mathcal{K} \left(\sqrt{1 - \frac{(\varepsilon + 1)^2}{4}} \right) \right\} \text{sign } v. \quad (22)$$

Соответствующий график представлен на рис. 2.

Поведение g_1 в случае, когда имеется поверхностная зона, иллюстрируется рис. 3 для $2v = -4$. Она проявляется не только в отличной от нуля плотности состояний вне объемной зоны проводимости (при $\varepsilon > 3$), но и в скачке плотности состояний внутри объемной зоны (при $\varepsilon \approx 0.125$, где находится минимум поверхностной зоны). Скачки вблизи экстремумов поверхностной зоны обусловлены тем, что плотность уровней в двумерной зоне остается там конечной. Из-за суперпозиции объемной и поверхностной зон плотность уровней как функция ε обнаруживает максимум внутри объемной зоны.

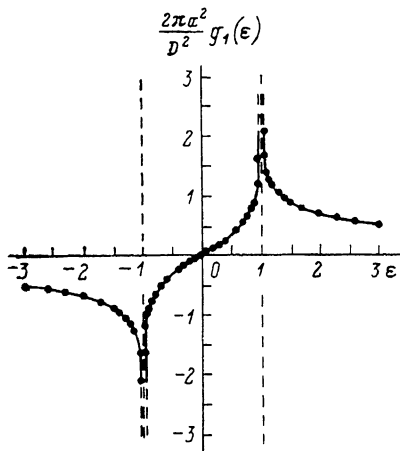


Рис. 2. Плотность уровней в пленках, ограниченных плоскостями (100), при $2v = -1$.

При $|v| \rightarrow \infty$ поверхностная зона отодвигается от объемной на бесконечность. Что же касается плотности уровней для объемной зоны, то она совпадает с результатом (17) при $v=0$, но с l , уменьшенной на 1. Этот

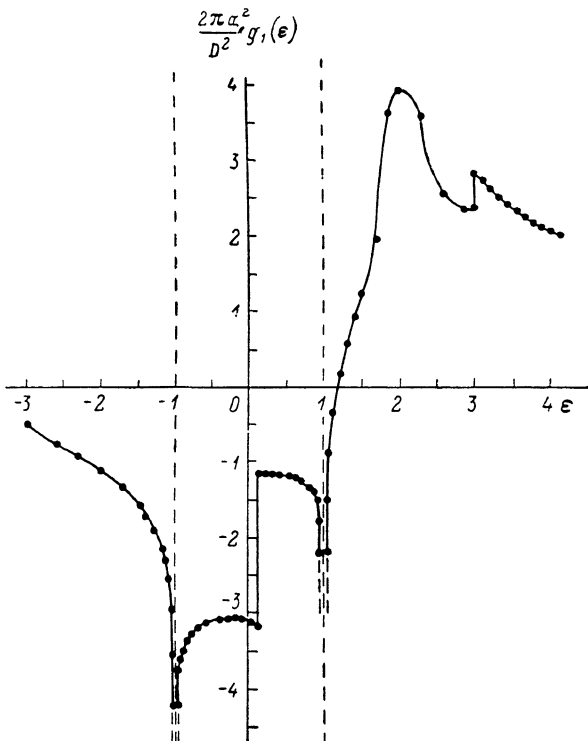


Рис. 3. Плотность уровней в пленках, ограниченных плоскостями (100), при $2v = -4$.

результат отражает тот факт, что поверхностные слои при $|v| \rightarrow \infty$ становятся недоступными для электронов с конечными энергиями.

Рассмотрим теперь случай, когда возмущен недиагональный матричный элемент, т. е. $\mathcal{K} \neq B$, но $B' = B$ и $U_0 = U_1 = U$. При $|\mathcal{K}|$, существенно

превышающих $|B|$, в спектре кристалла одновременно появляются две двукратно вырожденные поверхностные зоны — одна ниже, а другая выше объемной. Легко убедиться, полагая в (8) $\kappa=0$, что условие существования поверхностных зон есть

$$\xi^2 = \left(\frac{\mathcal{K}}{B}\right)^2 \geq 2. \quad (23)$$

Для описания вклада объемной зоны здесь удобно непосредственно исходить из уравнений (3). Тогда остаются в силе соотношения (16), (17), (20), (21), если заменить в них l на $l-1$ и соответственно L на $L-2a$. Вместо же $F(p)$ в (17) должно быть использовано выражение

$$R(p) = \frac{\beta^2}{2 \cos p \sin p} - \operatorname{ctg} p. \quad (24)$$

Получающееся выражение для g_1 в уже известных пределах ($\beta=1$, $\beta \rightarrow \pm\infty$) совпадает с полученными выше. На рис. 4 представлена $g_1(\varepsilon)$ при $\beta=2$, когда реализуются две поверхностные зоны.

Приведем также результаты аналогичного расчета для $\nu=0$, $\beta=1$, представленного на рис. 1, когда пленка ограничена плоскостями (110) (расчет дан в приложении)

$$g_1(\varepsilon) = \frac{a}{L\sqrt{2}} g_0(\varepsilon) - \frac{D^2}{4\pi^2 |B| a^2} \times \\ \times \left\{ \sqrt{\frac{8}{9-\varepsilon^2}} \mathcal{E} \left(\sqrt{\frac{8}{9-\varepsilon^2}} \right) \theta(1-\varepsilon^2) + \right. \\ \left. + \mathcal{E} \left(\sqrt{\frac{9-\varepsilon^2}{8}} \right) \theta(\varepsilon^2-1) \right\}. \quad (25)$$

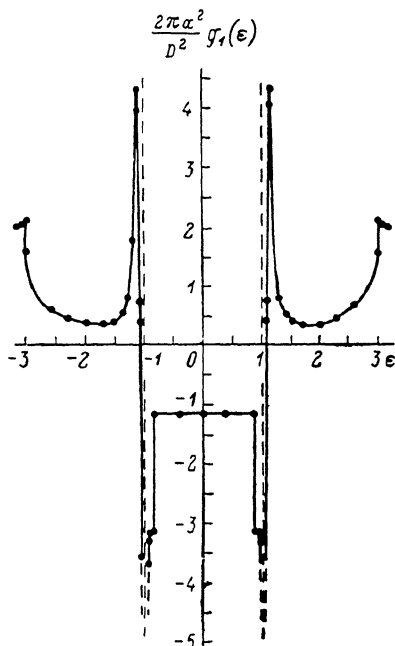


Рис. 4. Плотность уровней в пленках, ограниченных плоскостями (100), при $\beta=2$.

3. Обсуждение полученных результатов

Полученные выше результаты имеют непосредственный выход в эксперимент, поскольку ряд наблюдаемых величин непосредственно выражаются через плотность состояний. К ним прежде всего относятся электронная теплоемкость $C_l = \pi^2 T g(\mu)/3$ и парамагнитная восприимчивость $\chi = g(\mu)$ (k_B и магнетон Бора μ_B положены равными 1). Таким образом, результаты, представленные на рис. 1—4, непосредственно дают вклад поверхности в эти величины как функции химпотенциала μ . Если же требуется найти эти величины как функции концентрации, необходимо иметь в виду, что из-за наличия поверхности уровень Ферми сдвигается по сравнению со своим значением в массивном кристалле μ_0 на величину μ_1 . Таким образом, если μ лежит внутри объемной зоны, то вклад поверхности в величины C и χ пропорционален $g_1(\mu_0) + \mu_1 g'_0(\mu_0)$, где

$$\mu_1 = - \frac{1}{g_0(\mu_0)} \int_{\varepsilon_{\min}}^{\mu_0} g_1(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (26)$$

Разумеется, величина μ_1 имеет и самостоятельный интерес, коль скоро ей определяется, например, работа выхода электронов из металла.

Результаты численных расчетов μ_1 как функций концентрации носителей представлены на рис. 5—7. Прежде всего из рис. 1 и 5 видно, что с ростом индексов кристаллографических плоскостей, ограничивающих

кристалл, влияние поверхности возрастает: всюду абсолютные величины g_{110} и μ_{110} больше, чем g_{100} и μ_{100} .

Далее зависимость g_1 от концентрации электронов n при любых граничных условиях носит сложный немонотонный характер. При определен-

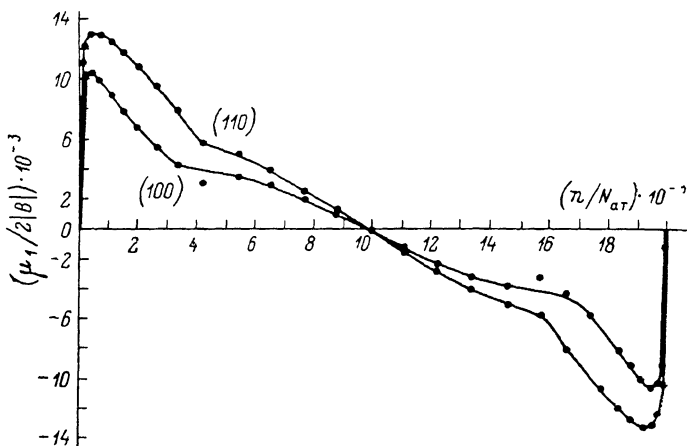


Рис. 5. Поверхностный вклад μ_1 в энергию Ферми в пленках, ограниченных плоскостями (100) или (110), при $\nu=0$.

ных заполнениях величина g_1 отрицательна. Следовательно, при таких n отрицательны и вклады поверхности в восприимчивость и электронную теплоемкость. Если первое явление можно интерпретировать как своеобразный поверхностный диамагнетизм, то второе такой наглядной интерпретации не имеет. Знакопеременна и величина $\mu_1(n)$ при симметричных граничных условиях ($\nu=0$). Если же поверхностный потенциал ν отличен от нуля, то при достаточно больших его значениях μ_1 знакопостоянен.

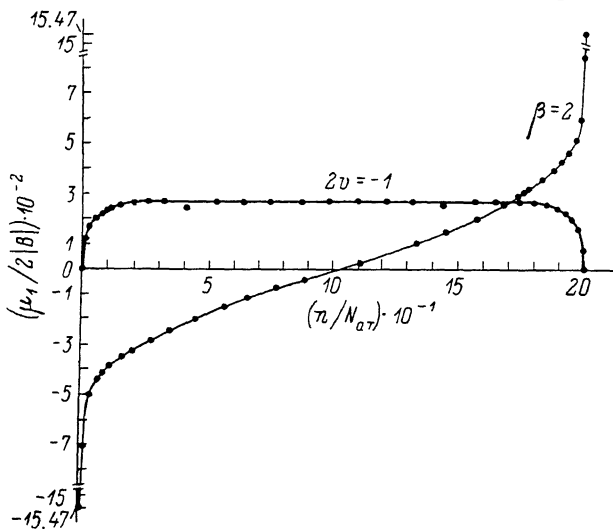


Рис. 6. Поверхностный вклад μ_1 в энергию Ферми при $2\nu=-1$ или при $\beta=2$.

Если менять условия на поверхности, то это может привести к появлению поверхностной зоны в тех случаях, когда ее не было, и к ее исчезновению, когда она была. Впрочем, если поверхностная зона исходно существовала для того, чтобы S_z и χ обнаруживали особенности типа скачков, достаточно, чтобы экстремумы поверхностной зоны сдвигались под внешними воздействиями. Тогда такие скачки возникнут при пересечении уровня Ферми экстремумом поверхностной зоны, лежащим внутри объемной зоны.

Реально сдвиг экстремумов поверхностной зоны можно осуществить, например, посредством адсорбции на поверхности. Если, например, адсорбируются электроотрицательные атомы, то электроны металла переходят на локальные уровни в этих атомах, лежащие ниже уровня Ферми. Поэтому уровень Ферми будет за счет этого сдвигаться вниз. С другой стороны, зарядение атомов соответствует подъему атомного потенциала U_0 на поверхности, в результате чего поверхностная зона сдвигается вверх. Такое встречное движение уровня Ферми и дна поверхностной зоны может привести к выходу μ из поверхностной зоны, из-за чего g_1 , а следовательно, и абсолютные значения C_1 и χ упадут скачком.

Изменение U_0 можно достичь и внешним электрическим полем (на более отдаленные атомы оно практически не повлияет из-за эффектов экранирования). Таким образом, это поле может вызвать электронный переход второго рода со скачками C и χ .

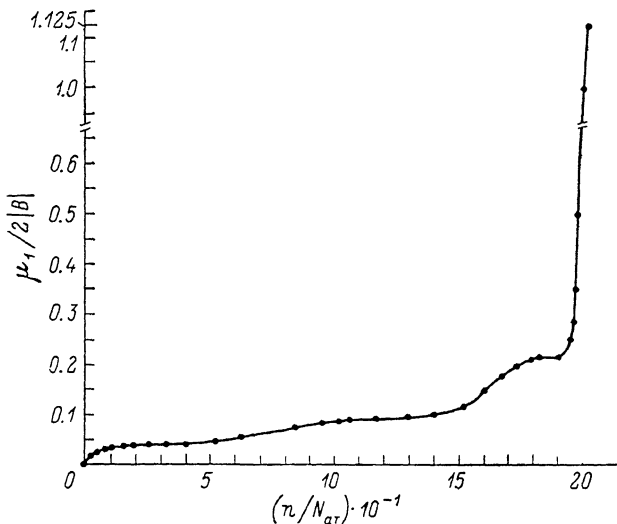


Рис. 7. Поверхностный вклад μ_1 в энергию Ферми при $2v = -4$.

Заметим, наконец, что полученные выше результаты легко обобщаются на другие квазичастицы в тонких пленках — магноны, акустические фононы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ПЛЕНКА, ОГРАНИЧЕННАЯ ПЛОСКОСТЯМИ (110)

В той же модели кристалла рассмотрим пластину толщины L по оси y , ограниченную с обеих сторон плоскими поверхностями (110). Если выбрать оси координат в плоскости (x, y) так, как показано на рис. 8, то координаты атомов в плоскости (x, y) в единицах a ($d = a\sqrt{2}$) имеют вид

$$\left\{ (f, g, h), \left(f \pm \frac{1}{2}, g \pm \frac{1}{2}, h \right) \right\}, \quad (\text{П, 1})$$

где f, h — номера атома в плоскости (110) по оси x и z соответственно; g — номер атома вдоль оси [110], совпадающей с осью y .

Ограничимся случаем, когда поверхность не возмущает матричных элементов гамильтониана. Тогда волновое уравнение записывается в виде

$$E\Psi_{f, g, h} = B \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta/2, g+\delta/2, h}, \quad (\text{П, 2})$$

$$E\Psi_{f, 0, h} = B \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta/2, 1/2, h}, \quad (\text{П, 3})$$

$$E\Psi_{f, l, h} = B \sum_{\delta} \Psi_{f+\delta/2, l-1/2, h}, \quad (\text{II}, 4)$$

где δ — нумерует ближайших соседей в плоскости (x, y) . Выбирая решение в виде

$$\Psi_{f, g, h} = e^{i(pf+kh)} \cos(qg + \varphi_0) \quad (\text{II}, 5)$$

и решая совместно уравнения (II, 3), (II, 4), отвечающие граничным условиям, находим спектр для волнового вектора q

$$q = \frac{\pi n}{l+1} \quad 1 \leq n \leq 2l+1. \quad (\text{II}, 6)$$

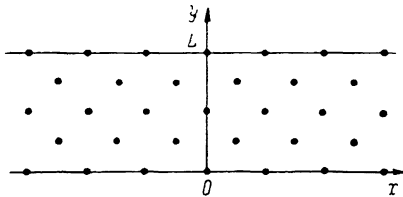


Рис. 8. Пленка, ограниченная плоскостями (110).

Плотность уровней в рассматриваемом случае дается выражением (без учёта спиновой двойки)

$$\begin{aligned} g(\mathcal{E}) &= \sum_{p, q, k} \delta\left(\mathcal{E} - 4B \cos \frac{q}{2} \cos \frac{p}{2} - 2B \cos k\right) = \\ &= \frac{1}{4\pi |B|} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathcal{E}t} \left\{ \sum_{p, q} e^{-i2t \cos \frac{p}{2} \cos \frac{q}{2}} \sum_k e^{-it \cos k} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{II}, 7)$$

где $\varepsilon = \mathcal{E}/2|B|$. Суммирование по p и k в (II, 7) производится путем стандартного перехода к интегрированию

$$\left. \begin{aligned} \sum_p e^{-i2t \cos \frac{p}{2} \cos \frac{q}{2}} &= N_x \mathcal{J}_0\left(2t \cos \frac{q}{2}\right), \\ \sum_k e^{-it \cos k} &= N_z \mathcal{J}_0(t). \end{aligned} \right\} \quad (\text{II}, 8)$$

При суммировании же по q воспользуемся формулой Эйлера—Маклорена

$$\begin{aligned} \sum_q \mathcal{J}_0\left(2t \cos \frac{q}{2}\right) &= \sum_{n=1}^{2l+1} \mathcal{J}_0\left(2t \cos \frac{\pi n}{2(l+1)}\right) = -2\mathcal{J}_0(2t) + \sum_{n=0}^{2l+2} \mathcal{J}_0\left(2t \cos \frac{\pi n}{2(l+1)}\right) = \\ &= \frac{l+1}{\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{J}_0\left(2t \cos \frac{x}{2}\right) dx - \mathcal{J}_0(2t) = \frac{2(l+1)}{\pi} \int_0^{\pi} \mathcal{J}_0(2t \cos z) dz - \mathcal{J}_0(2t) = \\ &= 2(l+1) \mathcal{J}_0^2(t) - \mathcal{J}_0(2t). \end{aligned} \quad (\text{II}, 9)$$

С учетом (II, 7)—(II, 9) получаем для g_1 формулу (26), где g_0 дается формулой (16).

Л и т е р а т у р а

- [1] Сандомирский В. Б. ЖЭТФ, 1967, т. 52, № 1, с. 158—166; Cotley A. A. Phys. St. Sol. (B), 1975, vol. 67, N 2, p. 619—622; 1978, vol. 88, p. 207—219; More R. M. Phys. Rev. (B), 1974, vol. 9, N 2, p. 392—403.
- [2] Valian R., Bloch C. Ann. Phys., 1970, vol. 60, p. 401.
- [3] Недорезов С. С. ЖЭТФ, 1966, т. 51, № 3 (9), с. 868—877.
- [4] Григорьева Л. К., Лидоренко Н. С., Нагаев Э. Л., Чижик С. П. ЖЭТФ, 1986, т. 91, № 3 (9), с. 1050—1062.