

## НЕАДИАБАТИЧНОСТЬ В ПОЛЯРИЗАЦИОННОМ ОПЕРАТОРЕ

И. Е. Драгунов, Е. В. Зароченцев, С. М. Орел

Неадиабатические электронные состояния в металлах образуют узкий слой  $|E_k - E_F| \sim \hbar \omega_D$  вблизи поверхности Ферми (ПФ). Из-за того что энергия Ферми  $E_F$  много больше  $\hbar \omega_D$  ( $\omega_D$  — дебаевская частота), удастся с высокой точностью вычислять в адиабатическом приближении интегральные по электронному спектру величины (см., например, [1]). Однако наличие таких состояний не позволяет описывать электронную систему как систему «голых» электронов и фононов с известным взаимодействием между ними. Это создает определенные трудности при выборе «затравочных» бозе-возбуждений в металлах, поскольку введение «затравочных» фононов автоматически предполагает участие электронов в их образовании. Представляется естественным в качестве «затравочных» бозе-возбуждений выбрать плазменные колебания ионов в нейтрализующем однородном отрицательном фоне. Подчеркнем, что вводимые в качестве «затравки» плазменные колебания не являются фононами, но фононы формируются в результате перенормировки их электрон-ионным взаимодействием.

Для определения энергетических спектров электронов и фононов получается система уравнений, а в групповой скорости фононов  $\partial \omega_{\lambda} / \partial \mathbf{q}$  при  $q \sim 2k_F$  ( $k_F$  — импульс Ферми) происходит существенное изменение характера особенности [2]. В низшем порядке по псевдопотенциалу массовый оператор фонона выражается через неприводимый поляризационный оператор  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$ , который в [2] вычислялся в приближении РПА. Оказалось, что коновская логарифмическая расходимость  $\ln |1 - 2k_F/q|$  в групповой скорости фонона исчезает. Вклад же неадиабатических электронных состояний обуславливает возникновение новой особенности, имеющей более сложный характер.

Наличие зонной структуры приводит к появлению в  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  при малых  $\mathbf{q} = (0, 0, q)$  ( $\hbar^2 q^2 / 2m \ll |V_g|^2 / E_g$ ,  $E_g = \hbar^2 (g/2)^2 / 2m$ ,  $V_g$  — экранированный форм-фактор псевдопотенциала) логарифмической расходимости. При вычислении

$$\Pi(\mathbf{q}, \omega) = 2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{n_k - n_{k+\mathbf{q}}}{E_{k+\mathbf{q}} - E_k - \hbar\omega} \quad (1)$$

была использована модель, в которой учитывается перестройка зонного спектра вблизи брэгговских плоскостей (БП)  $(0, 0, \pm g/2)$ . В этой модели  $E_k$  равно [3]

$$E_k = E_g + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \text{sgn} \left( k_z^2 - \frac{1}{4} g^2 \right) \sqrt{\left( E_g - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right)^2 + |V_g|^2}. \quad (2)$$

Логарифмическая особенность в  $\Pi(\mathbf{q}, \omega)$  появляется при выполнении условий

$$\begin{aligned} g/2 - k_z < q \leq q_{\text{БП}}, \\ \hbar q_{\text{БП}} / 2m = sW_g, \quad W_g = |V_g| / E_g, \quad s = \omega_{\text{БП}} / q_{\text{БП}}. \end{aligned} \quad (3)$$

Эта особенность обусловлена состояниями с  $k_z = g/2 \mp q$ , а компонента скорости  $v_x$  электрона с  $k_x = g/2 \mp q_{\text{БП}}$  равна  $2s$ . Аномальный вклад в поляризационный оператор зависит от положения ПФ относительно БП.

1. Если выполнены условия (3), а энергия Ферми такая, что  $E_F \ll E^{(1)} = E_g - |V_g|$  (рис. 1), аномальное слагаемое есть

$$\delta \Pi(\mathbf{q}, \omega) = - \frac{m^2 W_g}{4\pi^2 \hbar^4 q} (E_F - E^{(1)} + \hbar\omega) \ln |1 - q/q_{\text{БП}}|. \quad (4)$$

По мере приближения ПФ к БП этот вклад растет и при топологическом переходе ( $E_F = E^{(1)}$ ) достигает величины

$$\delta\Pi(q, \omega) = -\frac{m^2 s W_g}{4\pi^2 \hbar^3} \ln |1 - q/q_{кр}|. \quad (5)$$

В дальнейшем  $\delta\Pi(q, \omega)$  не меняется вплоть до значений  $E_F = E^{(2)} = E_g + |V_g|$ .

2. Появление электронного кармана во «второй» зоне  $E_F > E^{(2)}$  (рис. 2) приводит к возрастанию логарифмического вклада

$$\delta\Pi(q, \omega) = -\frac{m^2 s W_g}{4\pi^2 \hbar^3 q} (E_F - E^{(2)} + \hbar\omega) \ln |1 - q/q_{кр}|. \quad (6)$$

Такое поведение  $\delta\Pi(q, \omega)$  сохраняется, пока энергия Ферми не достигнет значений  $E_F = E^{(2)} + \hbar\omega_{кр}$ . При дальнейшем увеличении  $E_F$  вклад  $\delta\Pi(q, \omega)$  в поляризационный оператор не меняется и остается равным

$$\delta\Pi(q, \omega) = -\frac{m^2 s W_g}{2\pi^2 \hbar^3} \ln |1 - q/q_{кр}|. \quad (7)$$

Характер изменения  $\delta\Pi(q, \omega)$  в зависимости от положения уровня Ферми отражает поведение разности между числом занятых и свободных состоя-

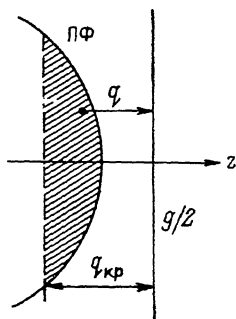


Рис. 1. Поверхность Ферми в «первой зоне».

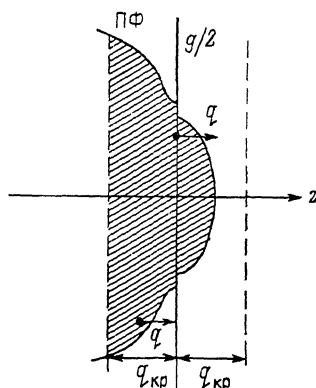


Рис. 2. Поверхность Ферми во «второй зоне».

ний с  $k_z = g/2 \mp q$  и  $k_z = g/2$ . В тех случаях, когда эта разность постоянна,  $\delta\Pi(q, \omega)$  не меняется.

Несмотря на логарифмическую расходимость  $\delta\Pi(q, \omega)$ , при  $q \rightarrow q_{кр}$  в законе дисперсии фононов нет особенностей, что связано с экранированием псевдопотенциала (см. [2]). Уравнение для  $\omega_{ql}$  нелинейное, т. е.  $\omega = f(q, \omega)$ , поэтому особенности в групповой скорости фонона будут обусловлены нулями знаменателя  $1 - \partial f / \partial \omega$  [2], а не аномальным поведением  $\Pi(q, \omega)$ .

Как показывает анализ, в групповой скорости фонона при  $q \sim q_{кр}$  имеются особенности полюсного типа. Аналогичное рассмотренному здесь изменение топологии ПФ происходит под давлением в In [4] и Al [5]. Поэтому можно ожидать проявления указанных особенностей в групповой скорости фонона в этих металлах. В частности, рассматриваемый в [1] (рис. 9) эксперимент по  $\partial\omega/\partial q$  в Al содержит вблизи точки  $\Gamma$ -особенности, которые можно трактовать с рассматриваемых в этом сообщении позиций. Однако для однозначных выводов нужны дополнительные эксперименты.

#### Список литературы

- [1] Бровман Е. Г., Каган Ю. М. // УФН. 1974. Т. 112. № 3. С. 369—426.  
 [2] Драгунов И. Е., Зароченцев Е. В., Орел С. М. // Препринт ДонФТИ-87-8 (128). Донецк, 1987.

- [3] Барьяхтар В. Г., Зароченцев Е. В., Орел С. М. // Препринт ИТФ-87-90Р. Киев, 1987.
- [4] Вольнский И. Я., Макаров В. И., Гани В. В. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 3. С. 1019—1033.
- [5] Overcash D. R., Tacy Davis, Cook J. W. Jr., Skove M. J. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 46. N 4. P. 287—290.

Донецкий физико-технический институт  
АН УССР  
Донецк

Поступила в Редакцию  
4 января 1989 г.  
В окончательной редакции  
21 июня 1989 г.

УДК 543.423:546.26—162

Физика твердого тела, том 31, в. 11, 1989  
Solid State Physics, vol. 31, N 11, 1989

## О ПРИРОДЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ РЕНТГЕНОВСКОГО ФОТОЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА C1S-ЭЛЕКТРОНОВ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

*Е. М. Байтингер, Ю. А. Тетерин, Ф. Ф. Кугеев*

Появление низкоэнергетических спутников в рентгеновских фотоэлектронных спектрах чаще связывают с возбуждением коллективных (плазменных) колебаний валентных электронов. Однако опыт свидетельствует о более сложной природе этого явления, обусловленного одновременным действием на систему остовой дырки и эмиттированного фотоэлектрона [1]. Ниже на примере C1S-спутников в кристаллах графита и алмаза обсуждаются результаты феноменологического подхода, аналогичного принятому при описании характеристических потерь энергии электронами [2, 3].

Для опытов использовали образцы сильно ориентированного пирографита, полученные термомеханической обработкой, а также монокристаллический образец искусственного алмаза, имеющий зеленоватый оттенок.

Измерения рентгеновских фотоэлектронных спектров проведены на электростатическом спектрометре НР 5950 А с использованием монохроматизированного Al K $\alpha$ -излучения в вакууме 10<sup>-7</sup> Па при комнатной температуре. В качестве стандарта для определения кинетической энергии фотоэлектронов использовалась 4f $_{7/2}$ -линия золота. Погрешность в воспроизведении тонкой структуры спутнитных линий составляла  $\pm 0.2$  эВ. На вставке к рис. 1 изображена принципиальная схема взаимного расположения образца 1 в спектрометре и анализатора электронов 2. Телесный угол, определяемый апертурой анализатора, 10<sup>-2</sup> ср, а средний угол выхода фотоэлектронов — 50°.

Перед регистрацией спектра производилась механическая чистка поверхности образцов. Контроль остаточных загрязнений поверхности осуществлялся по интенсивности O1S-линии кислорода. Фоновый сигнал при вычитании из экспериментального спектра был представлен линейной зависимостью.

Типичная тонкая структура спектра C1S-электронов, полученная на образцах графита, представлена на рис. 1, а (сплошная линия). Начало отсчета энергии связи совмещено с максимумом линии C1S-электронов. Обработка спектра проведена следующим образом. Колоколообразная зависимость интенсивности остовой линии спектра C1S-электронов аппроксимировалась гладкой аналитической функцией, состоящей из суммы гауссиана (в средней части) и лоренциана (хвост). При аппроксимации предполагалось, что форма линии симметрична. После этого подгоночная кривая вычиталась из экспериментальной. Наиболее интенсивные экстре-