УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

537.311.3

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРОВОДЯЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕТАЛЛА

А. Ф. Андреев

СОДЕРЖАНИЕ

1. Отражение от совершенной поверхности	. 114
2. Скользящие электроны	. 117
3. Ширина магнитных поверхностных уровней	. 122
Цитированная литература	. 124

Большинство явлений, происходящих в металле с достаточно большой длиной свободного пробега электронов, существенным образом зависит от характера взаимодействия электронов проводимости с границами образца. Обычно это взаимодействие описывается чисто феноменологически с помощью так называемого коэффициента зеркальности p, определяемого таким образом, что доля электронов, отражающихся от границы зеркально или диффузно, равна соответственно p и 1 — p. Поскольку длина волны проводящих электронов по порядку величины совпадает с межатомным расстоянием, а характерные размеры шероховатостей границы много больше этой величины, то обычно считалось, что коэффициент p близок к нулю или, что то же самое, отражение электронов близко к диффузному.

В последнее время, однако, было обнаружено много явлений, которые ясно указывают на то, что отражение электронов, по крайней мере в некоторых случаях, не является диффузным. Наиболее ярким примером являются наблюдавшиеся впервые Хайкиным¹ осцилляции поверхностного импеданса металла в слабых (порядка 1—10 э) магнитных полях. Как было показано Ни и Пранге², эти осцилляции можно объяснить, лишь предположив, что электроны, ответственные за осцилляции, отражаются от границы практически зеркально. Прекрасное согласие теории с экспериментом (см. ³) подтверждает такое предположение. Другим примером является наблюдение⁴ циклотронных резонансов, соответствующих движению электронов по траекториям, сопровождающимся отражением от поверхности металла. Отметим также, что, как было показано Шарвиным и Фишером⁵, в металле можно создавать и фокусировать пучки проводящих электронов.

Наиболее существенным здесь является то, что в настоящее время появляются возможности количественного экспериментального исследования действительного закона отражения проводящих электронов от поверхности металла. А это, в свою очередь, позволяет подойти к изучению свойств самой поверхности металла с принципиально новой точки зрения. Дело в том, что обычно структура поверхности изучается с помощью рассеяния света, рентгеновских лучей, электронов, палающих

8 УФН, т. 105, вып. 1

на поверхность из вакуума. Изучение рассеяния проводящих электронов (или других коротковолновых возбуждений) обладает, как мы увидим ниже, рядом принципиальных преимуществ, связанных с тем, что в данном случае речь идет о рассеянии квазичастиц самого кристалла, значительно лучше «чувствующих» кристаллическую симметрию.

1. ОТРАЖЕНИЕ ОТ СОВЕРШЕННОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Закон отражения проводящих электронов зависит, естественно, от структуры границы металла, от формы шероховатостей. Здесь следует различать те шероховатости, которые свойственны совершенной (т. е. тер-



Рис. 1.

модинамически равновесной) поверхности, и случайные шероховатости, связанные с несовершенством кристалла.

Рассмотрим сначала случай совершенной поверхности. Пусть функция ξ (ρ) определяет истинную форму кристалла, т. е. расстояния «крайних» атомов от плоскости, представляющей собой среднюю поверхность образца, ρ — двумерный вектор, лежащий в этой плоскости. Закон отражения электронов тесно связан со свойствами трансляционной симметрии функции ξ (ρ).

Поясним ситуацию сначала для простейшего случая двумерной квадратной решетки кристалла. Предположим, что средняя плоскость поверхности образца (в данном случае прямая) перпендикулярна направлению (11). На рис. 1, а, б изображены две возможные поверхности такого кристалла с заданным направлением средней линии. Можно сказать, что в случае 1, а поверхность имеет естественную трансляционную сим-

метрию данного среднего направления. Действительно, на прямой, параллельной направлению $\langle 11 \rangle$, в кристалле имеется периодичность всех свойств с периодом, равным диагонали элементарной ячейки (квадрата). В случае рис. 1, а поверхность кристалла, в частности функция $\xi(\rho)$, имеет трансляционную симметрию с тем же периодом. Напротив, в случае поверхности, изображенной на рис. 1, б, симметрия функции $\xi(\rho)$ ниже, чем симметрия средней линии поверхности. Период функции $\xi(\rho)$ вдвое превосходит диагональ квадрата. На поверхности в последнем случае происходит понижение кристаллической симметрия.

В общем случае классификацию возможных структур поверхности в зависимости от того, имеется естественная трансляционная симметрия ланной средней плоскости или нет, можно произвести следующим образом. Рассмоттрим совокупность всех возможных блоховских функций кристалла $u_{nk}e^{ikr}$, т. е. функций, осуществляющих представления соответствующей пространственной группы. Здесь k — квазиимпульс, n совокупность остальных квантовых чисел. Любая функция координат в кристалле может быть разложена по блоховским функциям. Блоховские функции с нулевым значением квазиимпульса представляют собой полный трансляционную симметрию набор функций, имеющих естественную (периодичность) кристалла. Наличие отличного от нуля квазиимпульса, вообще говоря, снимает естественную симметрию функции, однако не нарушает ее в плоскости, перпендикулярной направлению квазиимпульса. Отсюда ясно, что если граница кристалла имеет естественную симметрию средней плоскости, то функция ξ (р) должна разлагаться по блоховским

функциям с нулевыми проекциями квазиимпульса на среднюю плоскость:

$$\xi(\mathbf{\rho}) = \sum_{\mathbf{k}_t = 0} A_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{q}},\tag{1}$$

где суммирование происходит по всем значениям n и по всем \mathbf{k} , таким, что тангенциальные компоненты относительно средней плоскости \mathbf{k}_i исчезают, $A_{n\mathbf{k}}$ — некоторые постоянные.

Если граница кристалла пе имеет естественной симметрии, то в разложении типа (1) будут присутствовать также члены с отличными от нуля тангенциальными компонентами квазиимпульса. Набор этих величин \mathbf{k}_{t_1} , \mathbf{k}_{t_2} , . . . представляет собой в этом случае одну из наиболее важных характеристик структуры поверхности кристалла.

Перейдем теперь непосредственно к выяснению законов отражения проводящих электронов от границы. Во-первых, при отражении должна оставаться неизменной эпергия электрона. Это следует из того факта, что для электронов, находящихся вблизи поверхности Ферми, пги достаточно низких температурах задача об отражении является одпочастичной, т. е. электрон в течение всего процесса взаимодействия с поверхностью ивляется хорошей квазичастицей. Действительно, одночастичность задачи могла бы быть нарушена лишь процессами распада рассматриваемой квазичастицы на другие возбуждения (при нуле температуры). Известно, что для электронов в объеме металла вероятность этих процессов как угодно мала, если энергия электрона достаточно близка к энергии Ферми. При выводе этого утверждения используются лишь закон сохранения энергии и принцип Паули, которые остаются справедливыми и при наличии поверхности (исчезает лишь закон сохранения импульса). Ясно, поэтому, что наличие поверхности не нарушает одночастичности задачи.

Пусть $\psi_{\text{пад}}$ — волновая функция электрона, падающего на поверхность, $\psi_{\text{отр}}$ — волновая функция отраженного электрона. В общем случае они связаны друг с другом соотношением вида

$$\psi_{\rm orp} = \tilde{F}(\boldsymbol{\rho}) \,\psi_{\rm nag},\tag{2}$$

где $\tilde{F}(\mathbf{p})$ — некоторый линейный оператор, зависящий от координаты на средней плоскости. Если поверхность имеет естественную симметрию средней плоскости, то для этого оператора имеет место разложение по блоховским функциям вида (1), в которое входят лишь функции с $\mathbf{k}_t = 0$. Но это означает, что волновые функции падающего и отраженного электронов имеют одно и то же значение тангенциальных компонент квазиимпульса. Мы получили, таким образом, закон сохранения тангенциального квазиимпульса, вполне аналогичный закону сохранения касательного импульса при отражении обычных частиц от ровной поверхности. Существенно иметь в виду, однако, что этот закон имеет место не для всякой совершенной поверхности, а лишь для имеющей естественную симметрию. Так, сохранение \mathbf{k}_t имеет место для структуры, изображенной на рис. 1, *a*, и не имеет места для структуры рис. 1, *б*.

Пользуясь законами сохранения энергии и тангенциального квазиимпульса, легко определить все возможные состояния отраженного электрона. Изобразим изоэнергетическую поверхность, соответствующую энергии падающего электрона, и повторим ее периодически по всей обратной решетке (рис. 2). Пусть точка A соответствует состоянию падающего электрона. Проведем через точку A прямую, параллельную направлению нормали к поверхности кристалла (это есть прямяя \mathbf{k}_t =- const. на рисунке прямая FD). Точки B, D, E ... пересечения прямой с изоэнергетическими поверхностями — определяют возможные состояния отраженного электрона (остальные точки пересечения C, F, \ldots соответствуют электронам, двигающимся к поверхности, а не от нее).

115

Если нормаль к поверхности имеет некоторое случайное (иррациональное) направление относительно кристаллографических осей, то даже для поверхности, имеющей естественную симметрию, число возможных состояний отраженного электрона бесконечно, поскольку все точки *B*, *D*, *E*, ... в этом случае неэквивалентны. Этот факт связан в конечном счете с тем обстоятельством, что для иррационального направления



Рис. 2.

даже наиболее симметричная поверхность в обычном смысле слова не обладает никакой периодичностью. При отражении от такой поверхности частиц, падающих из вакуума, мы не получили бы сколько-нибудь простой картины. Для проводящих электронов имеется простой критерий, отличающий поверхности с естественной симметрией при любом направлении нормали — все состояния отраженного электрона можно уложить на опрелеленную прямую в обратной решетке.

Для рациональных направлений поверхности число возможных состояний отраженного электрона конечно, так как в этом случае существует лишь конечное число неэквивалентных точек пересечения.

Так, для нормали, параллельной прямой *PL* на рис. 2, таких точек две (*G* и *H*). Точки *O*, *L*, ... эквивалентны точке *H*, точки *K*, *P*, ... — точке *G*.

Если поверхность не имеет естественной симметрии, а характеризуется упоминавшимся выше набором двумерных векторов \mathbf{k}_{t_1} , \mathbf{k}_{t_2} , . . ., то разложение оператора $\hat{F}(\boldsymbol{\rho})$ по блоховским функциям имеет следующий вид:

$$\hat{F}(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{\mathbf{k}_t=0} \hat{f}_{n\mathbf{k}}^{(0)} u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\varrho}} + \sum_{\mathbf{k}_t=\mathbf{k}_{t_1}} \hat{f}_{n\mathbf{k}}^{(1)} u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\varrho}} + \sum_{\mathbf{k}_t=\mathbf{k}_{t_2}} \hat{f}_{n\mathbf{k}}^{(2)} u_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\varrho}} + \cdots,$$

где $\hat{f}_{nk}^{(0)}, \hat{f}_{nk}^{(1)}, \hat{f}_{nk}^{(2)}$ — некоторые операторы, не зависящие от **р**. Из формулы (2) видно, что в этом случае наряду с отражением с сохранением \mathbf{k}_t возможно изменение тангенциального квазиимпульса на векторы \mathbf{k}_{t_1} , \mathbf{k}_{t2}, \ldots Каждому из этих векторов в обратной решетке соответствует своя прямая, параллельная прямой $\mathbf{k}_t = \text{const.}$ Точки пересечения всех прямых с изоэнергетическими поверхностями определяют возможные состояния отраженного электрона. Так, если состояние падающего электрона изображается точкой A на рис. 2 (нормаль к границе параллельна прямым *FD* и *MN*) и имеется одно отличное от нуля значение \mathbf{k}_{t_1} , то, кроме отражений в *B*, *D*, *E*, ..., возможны также отражения в *M*, *N*, ...

Экспериментальное изучение закона отражения проводящих электронов позволяет, таким образом, непосредственно определить набор векторов $\mathbf{k}_{t_1}, \mathbf{k}_{t_2}, \ldots$, определяющих структуру поверхности. Следует отметить, что один и тот же кристалл может иметь поверхность с естественной симметрией для одних направлений нормали и без нее — для других. Кроме того, при изменении температуры или давления возможны своеобразные фазовые переходы, когда с кристаллом в объеме ничего не происходит, а меняются лишь свойства симметрии поверхности. Все

такие особенности легко выяснить, если известен закон отражения электронов.

Отметим также, что мы всюду рассматриваем отражение проводящих электронов, хотя все сказанное относится к любым другим коротковолновым возбуждениям кристалла, в частности, к дебаевским фононам.

2. СКОЛЬЗЯЩИЕ ЭЛЕКТРОНЫ

Задача о вычислении угловой зависимости коэффициента отражения может быть решена в общем виде для любой поверхности (совершенной или нет) в важном случае, когда скорость падающего электрона почти параллельна поверхности (скользящий электрон). Эта задача во многом аналогична известной задаче о рассеянии медленных частиц в квантовой механике (см. ⁶). Подчеркнем, что, поскольку квазиимпульс не совпадает по направлению со скоростью, его направление у скользящего электрона совершенно произвольно.

Если отражение скользящего электрона происходит с сохранением касательного квазиимпульса, то среди всех возможных состояний отраженного электрона существует одно с квазиимпульсом, близким к квазиимпульсу падающего электрона. Действительно, так как скорость направлена по нормали к изоэнергетической поверхности, то ясно. что прямая $\mathbf{k}_t = \text{const}$ почти перпендикулярна этой нормали и пересекает изоэнергетическую поверхность второй раз в близкой точке. Переход электрона при отражении в эту точку соответствует зеркальному отражению с малым изменением квазиимпульса. Именно такое отражение с подавляющей вероятностью происходит, как мы увидим, для скользящего электрона от произвольной поверхности металла, когда, вообще говоря, закона сохранения \mathbf{k}_t не существует.

Мы будем интересоваться вероятностью лишь зеркального отражения и в соответствии с этим рассматривать волновую функцию электрона ψ, описывающую «канал зеркального отражения», аналогично тому, как в теории неупругого рассеяния (см. ⁶) вводится волновая функция, описывающая «входной канал». Процессы отражения в любое другое состояние аналогичны в таком описании неупругим процессам.

Рассмотрим энергию электрона є (k) как функцию $k_x \equiv k$ (ось x нормальна к поверхности металла, занимающего область x < 0) при фиксированном \mathbf{k}_t , равном значению тангенциального импульса падающего электрона. Поскольку падающий электрон является скользящим и отражение происходит с малым изменением импульса, то существенна малая область значений k вблизи некоторой величины k_0 , которой соответствует нулевое значение нормальной к поверхности компоненты скорости:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial k}\Big|_{k=k_0} = 0.$$

Разлагая энергию є по степеням $(k - k_0)$, найдем

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \left(\mathbf{k}_t \right) + \hbar^2 \frac{(k - k_0)^2}{2m} \,, \tag{3}$$

где *т* — некоторая эффективная масса.

Такой вид имеет энергия электрона вдали от границы. При приближении к границе становится существенной потенциальная энергия U взаимодействия электрона с границей. Если считать, что характерный размер шероховатостей порядка межатомного расстояния a, то при $|x| \gg a$ влияние шероховатостей сглаживается и потенциальная энергия зависит только от х. Энергия электрона, таким образом, равна

$$\varepsilon = \varepsilon_0(\mathbf{k}_t) + \hbar^2 \frac{(k-k_0)^2}{2m} + U(x),$$

и мы можем написать следующее уравнение для зависящей от x части волновой функции:

$$\left\{\left(i\frac{d}{dx}+k_{0}\right)^{2}+\frac{2m}{\hbar^{2}}\left[\varepsilon_{0}+U\left(x\right)-\varepsilon\right]\right\}\psi=0.$$

Вводя новую неизвестную функцию $\phi = \psi e^{-ik_0x}$, преобразуем последнее уравнение к виду

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \left[q^2 - \frac{2m}{\hbar^2} U(x)\right]\varphi = 0, \tag{4}$$

где $\hbar q = \sqrt{2m(\varepsilon - \varepsilon_0)} = mv_x$, v_x — нормальная к поверхности компонента скорости падающего электрона. Для скользящего электрона выполнено условие $qa \ll 1$.

В области $1/q \gg |x| \gg a$ в уравнении (4) можно пренебречь двумя последними членами. Действительно, если это сделать, то мы получим

$$\varphi\left(x\right) = A + Bx,\tag{5}$$

где А, В — постоянные, зависящие от структуры границы металла.

Рассматривая теперь отброшенные члены как возмущение, легко видеть, что первый из них вносит вклад порядка $(qx)^2 \ll 1$, а второй порядка $(a/|x|)^{n-2}$, если $U(x) \sim |x|^{-n}$. Этот вклад также мал, если потенциальная энергия убывает быстрее, чем x^{-2} , — условие, которое фактически всегда выполнено.

Существенно, что отношение постоянных A и B при малых q не зависит от q. Это ясно из того, что уже при $|x| \ll x_0$, где x_0 определяется равенством $\hbar^2 q^2 \sim mU(x_0) (x_0 \gg a)$, в уравнении (4) можно пренебречь членом q^2 по сравнению с потенциальной энергией. Величина q при таких x, а тем более при $|x| \sim a$, вообще не входит в уравнение.

При $|x| \gg a$ в уравнении (4) можно пренебречь, вообще говоря, лишь последним членом. Решение можно тогда записать в виде

$$\varphi(x) = e^{iqx} + V e^{-iqx},\tag{6}$$

где V(q) — искомый коэффициент отражения. Из условия «сшивания» формул (5) и (6) при $qx \ll 1$ находим

$$V = -1 + \alpha q, \tag{7}$$

где $\alpha = 2iA/B = \alpha' + i\alpha''$.

Вероятность зеркального отражения определяется квадратом модуля коэффициента отражения

$$|V|^2 = 1 - 2\alpha' q = 1 - 2\alpha' \frac{mv_x}{\hbar}.$$

Его отличие от единицы пропорционально, таким образом, первой степени скорости v_x , или, что то же самое, первой степени малого угла между скоростью электрона и ее проекцией на плоскость границы металла. Для границы с атомными шероховатостями параметры α' и α'' по порядку величины совпадают с межатомным расстоянием.

Важно отметить, что вывод формулы (7) был основан по существу на двух предположениях. Во-первых, требовалось существование канала зеркального отражения с малым изменением квазиимпульса (малые q) и, во-вторых, возможность разложения функции ε (**k**) в степенной ряд. Первое предположение, кроме скользящих электронов, выполнено также для электронов, принадлежащих к малым группам, т. е. в случае, когда речь идет о малом замкнутом участке поверхности Ферми. Если в соответствующем участке k-пространства функция ε (k) аналитична (малая группа имеет в этом случае квадратичный спектр), то отражение даже и нескользящих электронов описывается формулой (7). В противном случае, например в случае висмута, требуется специальное рассмотрение с учетом конкретного вида особенности. Особая чувствительность задачи к аналитическим свойствам функции ε (k) связана с наличием вблизи поверхности классической точки поворота $V(x_0) = \varepsilon$.

Предположим теперь, что граница металла, наряду с атомными шероховатостями, имеет случайные макроскопические неровности. При вычислении влияния последних на коэффициент отражения электронов мы можем пренебречь малыми величинами αq , связанными с атомными шероховатостями. Из формул (6) и (7) видно тогда, что границу можно рассматривать чисто макроскопически, записав на ней условие $\psi = \varphi = 0$. Подчеркнем, что такой подход справедлив лишь для скользящих электронов или для малых групп с квадратичным спектром. В общем случае атомные шероховатости, всегда сопровождающие макроскопические неровности, нельзя не учитывать.

Граничное условие $\psi = 0$ применялось для исследования взаимодействия проводящих электронов с шероховатой границей металла в работах Грина и О'Доннела⁷, Чаплика и Эптина⁸, Канера, Макарова и Фукса⁹, Фальковского^{10, 11}, Сингала¹², Макарова и Фукса¹³.

Если амплитуда перовностей не слишком велика, то их влияние на движение электрона можно учитывать по теории возмущений. Пусть функция $x = \xi(\rho)$, где $\rho = (y, z)$, описывает поверхность металла со случайными макроскопическими неровностями. Выбирая усредненную поверхность в качестве плоскости x = 0, всегда можно добиться обращения в нуль среднего значения случайной величины $\xi(\rho)$. Статистические свойства поверхности описываются бинарной корреляционной функцией

$$\overline{\xi(\boldsymbol{\rho})}\,\overline{\xi(\boldsymbol{\rho}')} = d^2 w\,(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'),\tag{8}$$

где $d = \sqrt{\overline{\xi^2}}$ — среднеквадратичная высота неровностей, $w(\rho)$ — функция корреляции, удовлетворяющая условию w(0) = 1 и существенно убывающая на расстояниях l порядка характерной «длины волны» неровностей.

Перепишем граничное условие ψ (ξ , ρ) = ϕ (ξ , ρ) = 0, произведя разложение по степеням ξ с точностью до членов второго порядка включительно:

$$\varphi(\mathbf{\rho}) + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \,\xi(\mathbf{\rho}) + \frac{1}{2} \,\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \,\xi^2(\mathbf{\rho}) = 0, \tag{9}$$

где все величины взяты при x = 0.

В нулевом приближении по ξ волновая функция согласно (6), (7) и (9) имеет вид

$$\varphi = e^{i\mathbf{k}_t \varrho} \left\{ e^{iq(\mathbf{k}_t)x} - e^{-iq(\mathbf{k}_t)x} \right\},$$

где $\hbar q(\mathbf{k}_t) = mv_x$ при фиксированной эпергии является функцией касательного импульса \mathbf{k}_t . В следующих приближениях волновая функция содержит отраженные волны с различными значениями тангенциального импульса. Однако в силу того, что $\xi(\boldsymbol{\rho})$ мало меняется на атомных расстояниях, импульсы падающего и отраженного электронов должны быть близки друг к другу. Переходы на другие участки поверхности Ферми по этой причине невозможны, а потому связь нормального и тангенциального квазиимпульсов определяется одной и той же функцией q (\mathbf{k}_t). Будем искать волновую функцию в виде

$$\varphi = e^{\mathbf{i}\mathbf{k}_t \mathbf{Q}} \left\{ e^{\mathbf{i}q(\mathbf{k}_t)x} - e^{-\mathbf{i}q(\mathbf{k}_t)x} \right\} + \int \frac{d^2 \mathbf{k}'_t}{(2\pi)^2} F(\mathbf{k}'_t) e^{\mathbf{i}\mathbf{k}'_t \mathbf{Q} - \mathbf{i}q(\mathbf{k}'_t)x}, \tag{10}$$

где F (k_t) — неизвестная функция. Подставляя (10) в условие (9) и применяя метод последовательных приближений, найдем во втором приближении

$$F(\mathbf{k}_{t}') = -2iq(\mathbf{k}_{t})\xi(\mathbf{k}_{t}-\mathbf{k}_{t}') + 2q(\mathbf{k}_{t})\int \frac{d^{2}\mathbf{k}_{t}''}{(2\pi)^{2}}q(\mathbf{k}_{t}'')\xi(\mathbf{k}_{t}-\mathbf{k}_{t}'')\xi(\mathbf{k}_{t}''-\mathbf{k}_{t}'); \quad (11)$$

здесь $\xi(\mathbf{k}_t)$ — компонента Фурье функции $\xi(\boldsymbol{\rho})$:

$$\xi(\mathbf{\rho}) = \int \frac{d^2\mathbf{k}_t}{(2\pi)^2} \xi(\mathbf{k}_t) e^{i\mathbf{k}_t \mathbf{\varrho}}.$$

Для вычисления волновой функции, усредненной по ансамблю функций ξ, подставляем (11) в (10) и производим усреднение квадратичных по ξ членов согласно (8). Линейные члены исчезают при усреднении. В результате получаем

$$\overline{\varphi} = e^{i\mathbf{k}_t \mathbf{Q}} \{ e^{iq(\mathbf{k}_t)x} + V(\mathbf{k}_t) e^{-iq(\mathbf{k}_t)x} \},\$$

где коэффициент отражения равен

$$V(\mathbf{k}_t) = -1 + \frac{d^2}{2\pi^2} q(\mathbf{k}_t) \int d^2 \mathbf{k}'_t q(\mathbf{k}'_t) w(\mathbf{k}'_t - \mathbf{k}_t), \qquad (12)$$

 $w(\mathbf{k}_t)$ — компонента Фурье функции корреляции, определяющая распределение неоднородностей по «длинам волн» и нормированная условием

$$\int \frac{d^2 \mathbf{k}_t}{(2\pi)^2} w(\mathbf{k}_t) = 1.$$
(13)

Формула, аналогичная (12), для формально идентичной задачи о рассеянии электромагнитных волн на перовной поверхности была получена в работе Басса¹⁴.

Так как рассматриваемые неоднородности имеют характерные размеры, значительно превышающие межатомное расстояние, функция $w(\mathbf{k}_t)$ отлична от нуля лишь при малых значениях аргумента. Поэтому, если $q(\mathbf{k}_t)$ не слишком мало, именно $q(\mathbf{k}_t) \gg (la)^{-1/2}$, в формуле (12) можно заменить функцию $w(\mathbf{k}_t)$ на $(2\pi)^2 \delta(\mathbf{k}_t)$. Имеем тогда

$$V = -1 + 2 (qd)^2. \tag{14}$$

В обратном предельном случае $q(\mathbf{k}_t) \ll (la)^{-1/2}$ при вычислении входящего в (12) интеграла можно положить $q(\mathbf{k}_t) = 0$. Зависимость q от \mathbf{k}'_t легко определить, если разложить входящую в (3) величину $\varepsilon_0(\mathbf{k}'_t)$ по степеням $\mathbf{k}'_t - \mathbf{k}_t$, т. е. положить $\varepsilon_0(\mathbf{k}'_t) = \hbar \mathbf{v}_t (\mathbf{k}'_t - \mathbf{k}_t)$, где \mathbf{v}_t — тангенциальная компонента скорости падающего электрона. В результате получаем

$$\hbar q\left(\mathbf{k}_{t}^{\prime}\right) = \sqrt{2m\hbar \mathbf{v}_{t}\left(\mathbf{k}_{t}^{\prime}-\mathbf{k}_{t}\right)}.$$

Подставляя это в формулу (12) и производя несложное интегрирование, находим коэффициент отражения (функцию *w* считаем изотропной):

$$V = -1 + v_{x} d^{2} \left(1 + i\right) \left(\frac{16m^{3}v_{t}}{\pi^{3}\hbar^{3}l}\right)^{1/2} \Gamma^{2} \left(\frac{3}{4}\right) \int_{0}^{\infty} \varkappa^{3/2} f(\varkappa) d\varkappa, \qquad (15)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция; мы ввели вместо w соответствующую безразмерную функцию $f(x) = (2\pi l^2)^{-1}w(x/l)$ безразмерного аргумента x, так что входящий в (15) интеграл по порядку величины равен единицы.

Формула (15) показывает, что для предельно скользящих электронов вероятность незеркального отражения, в согласии с общей формулой (7), пропорциональна первой степени нормальной компоненты скорости. Сравнение формул (15) и (7) показывает также, что постоянная α , характеризующая макроскопические неоднородности границы, по порядку величины равна $d^2/(la)^{1/2}$. Таким образом, если макроскопические неоднородности таковы, что $d^4/l \gg a^3$, то они дают основной вклад и коэффициент отражения определяется формулой (15). В обратном предельном случае более существенны атомные шероховатости, всегда имеющиеся на макроскопически неровной границе, и коэффициент отражения определяется формулой (7) с $\alpha \sim a$.

Как было показано выше, формулу (12) можно применять и для нескользящих электронов, если речь идет об отражении электронов, принадлежащих к малым (регулярным) группам. При этом для неровностей с характерной «длиной волны» l, значительно большей обратного диаметра (2 p_0) участка поверхности Ферми, соответствующего рассматриваемой группе, по-прежнему справедливы формулы (14) и (15), причем первая из них — в случае, когда $q \gg (p_0/l)^{1/2}$, вторая — в случае $q \ll \ll (p_0/l)^{1/2}$. Поскольку p_0 много меньше обратного межатомного расстояния, для макроскопических неровностей может осуществляться неравенство $p_0 l \ll 1$. При этом из (12) получается следующее выражение для коэффициента отражения (для простоты считаем здесь эффективную массу m изотропной):

$$V = -1 + v_{\mathbf{x}} d^2 \frac{2m}{\hbar l} \left\{ \frac{1}{3} \left(p_0 l \right)^3 f(0) + i \int_0^\infty \varkappa^2 f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right\}.$$
(16)

Вероятность незеркального отражения определяется в основном вещественной частью коэффициента V. Сравнение (16) с (7) показывает, что в данном случае вкладом атомных шероховатостей в указанную вероятность можно пренебречь, если $d^2l^2 \gg a/p_0^3$.

В работе Фальковского ¹⁰ выведено граничное условие для функции распределения скользящих электронов, описывающее их взаимодействие с шероховатой поверхностью металла, и полученный результат применен для исследования влияния свойств поверхности на высокочастотный импеданс металла в отсутствие магнитного поля. В условиях сильно аномального скин-эффекта, когда длина свободного пробега электронов ($v\tau$) зпачительно превосходит глубину скин-слоя δ , основной вклад в импеданс вносят, как известно ¹⁵, скользящие электроны. Так как закон отражения скользящих электронов близок к зеркальному, поверхностный импеданс Z близок к известному (см. ¹⁵) значению Z_0 , вычисленному для точно зеркальной границы, и отличается от него на величину, равную

$$Z - Z_0 \sim Z_0 \frac{d^2}{l^{1/2} a^{3/2}} \frac{\delta}{v \tau}$$

при $\upsilon au / \delta \gg (l/a)^{1/2} \ln (l/a)$ и

$$Z - Z_0 \sim Z_0 \left(\frac{v \tau d}{\delta l}\right)^2 \ln \left\{\frac{\delta}{v \tau} \left(\frac{l}{a}\right)^{1/2}\right\}$$

при $v\tau/\delta \ll (l/a)^{1/2} \ln (l/a).$

Поверхностный импеданс оказывается вполне определенным образом связанным с характеристиками поверхности *l*, *d*.

3. ШИРИНА МАГНИТНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ УРОВНЕЙ

Обнаруженные Хайкиным¹ осцилляции поверхностного импеданса металла в слабых магнитных полях являются резонансами, соответствующими переходам между различными магнитными поверхностными уровнями². Эти уровни возникают для скользящего электрона, двигающегося вблизи границы металла в магнитном поле по траекториям типа изображенной на рис. 3. Участки траектории между последовательными столкновениями с границей приближенно являются окружностями с радиусом



 $R = v_y/\Omega$, где $\Omega = eH/mc$, m — фигурирующая в формуле (3) эффективная масса, магнитное поле направлено вдоль оси z. Площадь заштрихованного на рисунке сегмента равна (2/3) $R^2\theta^3$. Согласно квазиклассическому правилу квантования поток магнитного поля через эту площадь должен равняться целому числу (n) квантов потока

$$\frac{2}{3}R^2\theta^3 H = \frac{2\pi\hbar c}{e}n,$$

откуда находим возможные значения угла θ :

$$\theta_n = \left(3\pi \frac{\hbar\Omega}{mv_y^2} n\right)^{1/3}.$$
 (17)

Уровни энергии получаются отсюда подстановкой в формулу $\varepsilon = \varepsilon_0 (\mathbf{k}_t) + + \hbar^2 q^2/2m$ величины q в виде $\hbar q = m v_u \theta$:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \left(\mathbf{k}_t \right) + \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{3\pi}{2} v_y \hbar \Omega n \right)^2 \right\}^{1/3}.$$
 (18)

Осцилляции наблюдаются в полях порядка 1—10э. Согласно (17) таким значениям магнитного поля соответствуют углы $\theta \sim 10^{-2} - 10^{-3}$, так что речь действительно идет о скользящих электронах.

Вполне определенные значения (18) для уровней эпергии получены в предположении полностью зеркального отражения электронов от границы. В действительности электрон всегда имеет отличную от нуля вероятность незеркального отражения и благодаря этому точные стационарные уровни превращаются в квазистационарные с конечной вероятностью распада, т. е. с конечной шириной.

Вычисление ширины магнитных поверхностных уровней для металла с шероховатой границей производилось в работах Пранге и Ни¹⁶, Канера, Макарова и Фукса⁹, Фишбека и Мерчинга¹⁷, Сингала¹². Наиболее последовательная и полная теория была развита Фальковским¹¹, а затем Макаровым и Фуксом¹³.

Для установления количественной связи между шириной магнитных поверхностных уровней и коэффициентом отражения электронов достаточно сравнить волновую функцию отраженного электрона Ve^{-iqx} с ее значением — e^{-iqx} в случае полностью зеркального отражения, т.е. в случае, когда справедливо условие $\psi = 0$ на границе. Видно, что в результате единичного отражения волновая функция приобретает добавочный множитель (-V). За время t электрон испытывает N = t/Tотражений, где $T = 2\theta/\Omega$ — время между столкновениями с поверхностью, поэтому добавочный множитель в волновой функции равен

$$(-V)^{N} = e^{N \ln (-V)} \approx e^{-N(1+V)} = \exp\left\{-i \frac{t}{\hbar} \left[\frac{\hbar\Omega}{2i\theta}(1+V)\right]\right\}$$

Мы воспользовались здесь тем, что коэффициент V для скользящих электронов близок к —1. Так как волновая функция пропорциональна $\exp(-i\epsilon t/\hbar)$ (ϵ — энергия), то добавочный множитель эквивалентен прибавлению к энергии комплексной величины $[(\hbar\Omega)/(2i\theta)](1+V)$. Ее мнимая часть определяет искомую ширину уровней

$$\gamma = \frac{\hbar\Omega}{2\theta} \operatorname{Re} \left(1 + V\right). \tag{19}$$

Кроме того, возникает изменение вещественной части энергии, т.е. сдвиг уровней на величину

$$\delta \varepsilon = \frac{\hbar \Omega}{20} \operatorname{Im} \left(1 + V \right). \tag{20}$$

Подставляя в (19) и (20) коэффициент отражения в виде (7), найдем

$$\gamma = \frac{m v_y \alpha'}{2} \Omega, \quad \delta \varepsilon = \frac{m v_y \alpha''}{2} \Omega, \tag{21}$$

откуда видно, что шероховатости атомного масштаба приводят к ушире нию и сдвигу уровней, пропорциональным первой степени магнитного поля. Уширение и сдвиг, обусловленные макроскопическими неровностями, для достаточно слабых магнитных полей $\Omega \ll (a/l)^{3/2} (\varepsilon_F/n\hbar)$ также пропорциональны первой степени *H*. Действительно, в этом случае, как видно из (17), углы θ малы по сравнению с $(a/l)^{1/2}$ и можно воспользоваться формулой (15) для коэффициента отражения. В результате получаем

$$\gamma = \delta \varepsilon = \Omega d^2 \left(\frac{4m^3 v_t v_y^2}{\pi^3 \hbar l} \right)^{1/2} \Gamma^2 \left(\frac{3}{4} \right) \int_0^\infty \varkappa^{3/2} f(\varkappa) \, d\varkappa.$$
(22)

Если $\Omega \gg (a/l)^{3/2} (\epsilon_F/n\hbar)$, то подстановка в (19) коэффициента V из (14) дает

$$\gamma = \Omega^{4/3} \left(\frac{3\pi n}{\hbar^2} m^5 v_y^4 \right)^{1/3} d^2.$$
 (23)

Сдвиг уровней в данном случае значительно меньше ширины.

Для применимости формулы (23) в действительности требуется добавочное ограничение на величину поля сверху $\Omega \ll (\hbar v_l n/ml^3)^{1/2}$. Дело в том, что при $\Omega \ge (\hbar v_l n/ml^3)^{1/2}$ путь $v_l T$, проходимый электроном между последовательными соударениями с поверхностью металла, становится порядка или меньше корреляционной длины l. При этом нарушается условие статистической независимости различных столкновений электрона с поверхностью, предполагавшееся выполненным при выводе формул (19) и (20). Если имеется корреляция между различными столкновениями, то между шириной уровней и коэффициентом отражения не существует непосредственной связи. Тем не менее ширину можно выразить через корреляционную функцию неровностей $f(\varkappa)$. В предельном случае $\Omega \ge (\hbar v_l n/ml^3)^{1/2}$ вычисления (см. ¹¹, ¹³) приводят к следующей формуле:

$$\gamma = 2\pi \Omega^2 l \, \frac{(m v_y d)^2}{\hbar v_t} \, \int_0^\infty f(\varkappa) \, d\varkappa. \tag{24}$$

При увеличении поля, таким образом, ширина уровней, обусловленная макроскопическими неровностями, сначала пропорциональна H_* затем $H^{4/3}$ и, наконец, H^2 .

Если речь идет о магнитных поверхностных уровнях электронов, принадлежащих к малым группам, то для крупномасштабных неровностей $(p_0 l \gg 1)$ формула (22) применима при $\Omega \ll (\hbar^2 p_0/m^2 l^3 n^2)^{1/2}$, формула (23) при $(\hbar^2 p_0/m^2 l^3 n^2)^{1/2} \ll \Omega \ll (\hbar^2 p_0 n/m^2 l^3)^{1/2}$, формула (24) при $\Omega \gg$ $\gg (\hbar^2 p_0 n/m^2 l^3)^{1/2}.$

Для мелкомасштабных макроскопических неровностей ($a \ll l \ll 1/p_0$) пирину уровней и сдвиг находим, подставляя в (19) и (20) формулу (16):

$$\gamma = \frac{1}{3} \Omega (dl)^2 m v_y p_0^3 f(0), \qquad \delta \varepsilon = \Omega d^2 \frac{m v_y}{l} \int_0^\infty \varkappa^2 f(\varkappa) d\varkappa. \tag{25}$$

Ширина в данном случае значительно меньше сдвига.

Количественное экспериментальное исследование ширины магнитных поверхностных уровней было проведено Кохом и Муреем ¹⁸ на образцах галия и олова. В области не слишком малых значений магнитного поля измеренная ширина резонансов изменялась с магнитным полем по квадратичному закону, что находится в полном соответствии с законом (24). В меньших полях наблюдалось ослабление зависимости от поля, что также согласуется с предсказаниями теории. Кроме того, в работе ¹⁸ производилось специальное исследование состояния поверхности (измерялись параметры l и d). К сожалению, поверхности Ферми галия и олова недостаточно хорошо изучены, поэтому из измерений поверхностных уровней оказалось возможным оценить лишь параметры энергетического спектра электронов, ответственных за осцилляции. Существует, однако, целый ряд металлов (например, висмут, медь), поверхности Ферми которых полностью известны и на которых наблюдаются осцилляции в слабых полях. Измерения ширины уровней в этих случаях позволили бы делать количественные заключения о состоянии поверхности металла.

Институт физических проблем AH CCCP

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- 1. М. С. Хайкин, ЖЭТФ 39, 212 (1960). 2. Т. W. Nee, R. E. Prange, Phys. Rev. Lett. 25A, 582 (1967). 3. М. С. Хайкин, УФН 96, 409 (1968).

- 4. М. С. Хайкин, В. С. Эдельман, ЖЭТФ 47, 878 (1964). 5. Ю. В. Шарвин, Л. М. Фишер, Письма ЖЭТФ 1, 54 (1965). 6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963. § 140.
- 7. Ř. F. Greene, R. W. O'Donnell, Phys. Rev. 147, 599 (1966). 8. А. В. Чаплик, М. В. Энтин, ЖЭТФ 55, 990 (1968).
- 9. Э. А. Канер, Н. М. Макаров, И. М. Фукс, ЖЭТФ 55, 931 (1968). 10. Л. А. Фальковский, Письма ЖЭТФ 11, 181 (1970).

- 10. Л. А. Фальковский, Письма ЖЭТФ 11, 181 (1970).
 11. Л. А. Фальковский, ЖЭТФ 58, 1830 (1970).
 12. S. P. Singhal, Lett. Nuovo Cimento 4, 1079 (1970).
 13. Н. М. Макаров, И. М. Фукс, ЖЭТФ 60 (2), (1971) (в печати).
 14. Ф. Г. Басс, Изв. вузов (Радиофизика) 4, 476 (1961).
 15. G. E. Reuter, E. H. Sondheimer, Proc. Roy. Soc. A195, 336 (1949).
 16. R. E. Prange, T. W. Nee, Phys. Rev. 168, 779 (1968).
 17. H. J. Fischbeck, J. Mertsching, Phys. Stat. Sol. 27, 345 (1968).
 18. T. F. Koch, T. E. Murray, Phys. Rev. 186, 722 (1969).