

Таким образом, в соответствии с изложенным выше экспериментальные данные [1] подтверждают существование в металлах специфических электромагнитных мод — приповерхностных доплеронов.

Авторы признательны А. П. Королюку за стимулирование выполнения настоящей работы.

D. E. ZHEREBCHESKY and L. T. TSYMBAL

## NEARSURFACE DOPPLERON-PHONON RESONANCE IN METALS

(Short note)

Specific type of electromagnetic mode in a metal propagating near the surface — nearsurface doppleron — is described in this paper. This mode is excited by the acoustic Rayleigh wave and has two components. It leads to the existence of two magnetic field-separated nearsurface doppleron-phonon resonances.

### LIST OF SYMBOLS

$H$ , constant magnetic field;  $\omega$ , wave frequency;  $E$ , electric field of the wave;  $c$ , light velocity;  $\rho$ , density;  $j$ , current density;  $U$ , lattice displacement vector;  $\lambda_{\alpha\beta\gamma\delta}$ , tensor of elastic moduli;  $f$ , density of electron force acting on the lattice;  $t$ , time;  $c_l$ ,  $c_t$ , longitudinal and transverse sound velocities in metal;  $\nu$ , frequency of collisions;  $\Omega$ , cyclotron frequency;  $e$ , electron charge;  $g$ , induction electric field;  $k$ , wave vector;  $\sigma_{\alpha\beta}$ , Fourier component of the metal conductivity;  $R$ , cyclotron radius;  $v$ , electron velocity.

### FIGURE CAPTIONS

*Fig. 1.* Spectrum of nearsurface dopplerons resonance-excited by the Rayleigh sound wave.

*Fig. 2.* Experimental dependence of surface sound amplitude in tungsten upon magnetic field [1]. The arrows show the location of nearsurface doppleron-phonon resonances.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Писарев Л. Т., Цымбал Л. Т. Поверхностный ультразвук в вольфраме и техника его возбуждения. — ФТТ, 1983, 25, вып. 9, с. 2800—2802.
2. Tsybal L. T., Butenko T. F. Doppleron-phonon interaction in Cd. — Solid State Commun., 1973, 13, N 6, p. 633—637.
3. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — М.: Наука, 1965. — 320 с.
4. Жеребчевский Д. Э. Связанные электромагнитные и звуковые волны в пластине компенсированного металла. — ФНТ, 1984, 10, вып. 7, с. 713—722.

Донецкий физико-технический  
ин-т АН УССР

Получено 17.08.84

УДК 539.2

Г. Е. ГРЕЧНЕВ

## ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКА БОЛЬШОЙ МОЩНОСТИ НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ МЕТАЛЛОВ

В рамках метода псевдопотенциалов рассчитана зонная структура электронного спектра непериодического металла при наличии стоячей ультразвуковой волны. Установлено, что вблизи граней зоны Бриллюэна сверхструктурные расщепления в спектре, обусловленные появлением дополнительного длинного периода, определяются электронными переходами типа процессов переброса и существенно превосходят «звуковые» щели вблизи дна зоны проводимости. Основные энергетические щели на брэгговских плоскостях, соответствующих векторам обратной решетки  $G$ , квазиколлинеарным амплитуде звука  $u_0$ , заметно уменьшаются с увеличением  $u_0$ .

Влияние ультразвука (УЗ) на электронный спектр кристаллов рассматривалось ранее в [1–3]. В этих работах исследовалось движение электронов

проводимости в пространственно-периодическом поле УЗ волны. Было установлено, что в таком квазистационарном поле для электронов, движущихся в направлении волнового вектора УЗ  $\mathbf{Q}$ , непрерывный спектр  $E(\mathbf{k})$  распадается на совокупность чередующихся разрешенных и запрещенных зон. Вблизи дна зоны проводимости ширина разрешенной зоны определяется в основном длиной волны УЗ:  $E_0 \sim \hbar^2/(2m\lambda^2)$ , а ширина запрещенной — амплитудой:  $E_Q \sim \delta V_d$ , где  $\delta$  — деформация в волне,  $V_d$  — потенциал деформации. Для экспериментального наблюдения такого чередования зон необходимо выполнение условия  $E_0 \geq E_Q \geq k_B T$  [1,3]. Согласно оценкам [1,3], даже при гелиевых температурах для этого необходим достаточно мощный гиперзвук ( $\omega \geq 10^{11}$  гц,  $P \geq 10$  вт/см<sup>2</sup>). Очевидно, что экспериментальное обнаружение эффекта сопряжено со значительными техническими трудностями.

В работе [4] было показано, что когерентная перестройка электронного спектра вблизи граней зоны Бриллюэна в непереходных металлах приводит к перенормировке длинноволновой области фононного спектра. Возникает вопрос: а возможен ли обратный эффект — перестройка зонной структуры электронного спектра вблизи брэгговских плоскостей при введении в металл низкочастотных когерентных фононов (т. е. ультразвука)? В настоящей работе в рамках теории псевдопотенциалов изучается дифракция электронов на кристаллической решетке со стоячей волной смещений:

$$\delta \mathbf{r}_j = \mathbf{u}_0 \sin(\mathbf{Q} \mathbf{r}_j) \sin(\omega t) \equiv \mathbf{u} \sin(\mathbf{Q} \mathbf{r}_j), \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_j$  — равновесное положение иона. В случае  $\omega \tau \ll 1$  ( $\tau$  — время релаксации электронов проводимости) звуковую волну можно рассматривать как квазистатическое внешнее поле, действующее на электроны [5], а окончательный результат должен быть усреднен по периоду УЗ колебаний. С другой стороны, для того чтобы электрон на длине свободного пробега  $l$  «ощутил» периодическое поле УЗ волны, должно выполняться условие  $Ql \geq 1$ . Следовательно,

$$s/l \leq \omega \ll \tau^{-1} = v_F/l \quad (2)$$

( $s$  — скорость звука,  $v_F$  — фермиевская скорость электронов).

При рассмотрении в адиабатическом приближении [6-8] предполагается, что распространяющийся в кристалле электрон проводимости находится в поле «замороженной» решетки эффективно экранированных смещенных ионов. Известно [7,8], что при описании электрон-фононного взаимодействия в непереходных металлах в рамках приближения линейного экранирования такие псевдоатомы можно считать «жесткими», т. е. предполагать, что их потенциалы при смещениях остаются неизменными и что суммарный эффективный потенциал решетки можно записать в виде суперпозиции псевдопотенциалов:

$$W(\mathbf{r}) = \sum_j \omega(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \delta \mathbf{r}_j). \quad (3)$$

(Рассчитанные в этом приближении для непереходных металлов константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$  согласуются с экспериментальными данными [9]).

В рамках псевдопотенциального формализма для определения зонной структуры металла необходимо найти собственные значения гамильтониана, имеющего в представлении плоских волн вид

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \mathcal{H} | \mathbf{k} \rangle = k^2 \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}} + \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | W | \mathbf{k} \rangle. \quad (4)$$

Матричный элемент псевдопотенциала (3) факторизуется [7,8]:

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | W | \mathbf{k} \rangle = S(\mathbf{q}) \langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle. \quad (5)$$

Формфактор  $\langle \mathbf{k} + \mathbf{q} | \omega | \mathbf{k} \rangle$  определяется эффективным потенциалом от-

дельного псевдоатома, в то время как информация о расположении ионов в решетке содержится в структурном факторе

$$S(\mathbf{q}) = N^{-1} \sum_j \exp \{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_j + \delta\mathbf{r})\} = \\ = N^{-1} \sum_j \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \exp\{-i(\mathbf{q}\mathbf{u}) \sin(\mathbf{Q}\mathbf{r}_j)\} \quad (6)$$

(для упрощения выкладок рассматриваем кристалл с одним атомом на элементарную ячейку;  $N$  — число атомов). Второй сомножитель в (6) может быть преобразован с помощью производящей функции Якоби — Ангера для функций Бесселя  $J_n$  [10]:

$$\exp(iz \sin \varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\varphi) J_n(z). \quad (7)$$

Соответственно получаем

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\mathbf{q}\mathbf{u}) S_0(\mathbf{q} - n\mathbf{Q}), \quad (8)$$

где  $S_0(\mathbf{q} - n\mathbf{Q}) = \delta_{\mathbf{q} - n\mathbf{Q}}$ ,  $\mathbf{G}$  — структурный фактор идеального кристалла;  $\mathbf{G}$  — вектор обратной решетки. Таким образом, матричные элементы псевдопотенциала (5) отличны от нуля, когда они связывают пары электронных состояний, различающиеся на вектор  $\mathbf{q} = \mathbf{G} + n\mathbf{Q}$ , где  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

При построении гамильтониана (4) для электронных состояний вблизи дна зоны проводимости необходимо учитывать плоские волны типа  $|\mathbf{k} - N\mathbf{Q}\rangle, \dots, |\mathbf{k}\rangle, \dots, |\mathbf{k} + N\mathbf{Q}\rangle$ , приводящие, согласно (8), к ненулевым матричным элементам. Поскольку  $|\mathbf{Q}\mathbf{u}_0| \ll 1$ , значения  $J_n(\mathbf{Q}\mathbf{u})$  быстро спадают к нулю с увеличением  $n$ , и в матрице гамильтониана достаточно ограничиться элементами с  $J_1 \equiv J_1(\mathbf{Q}\mathbf{u})$ :

$$\begin{pmatrix} J_1 \omega(\mathbf{Q}), & |k - n\mathbf{Q}|^2, & J_1 \omega(\mathbf{Q}) \\ J_1 \omega(\mathbf{Q}), & |k - (n-1)\mathbf{Q}|^2, & J_1 \omega(\mathbf{Q}) \\ 0 & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

(В случае поперечной УЗ волны недиагональные матричные элементы точно обращаются в нуль. Для параметров, соответствующих продольной мощной УЗ волне в металле ( $\omega \approx 10^{11}$  эВ,  $u_0 \sim 0,1$  А,  $\omega(\mathbf{Q}) \sim -0,1$  ридб,  $s \sim 10^5$  м/сек), вычисление собственных значений симметричной трехдиагональной матрицы (9), проведенное с использованием эффективного QL алгоритма [11], дает картину чередующихся разрешенных и запрещенных зон с  $\epsilon_0 \sim \epsilon_Q \lesssim 10^{-5}$  ридб, согласующуюся с оценками [1,3].

Рассмотрим перестройку электронного спектра необходимого металла вблизи брэгговской плоскости, обусловленную наличием УЗ волны. Здесь, согласно (5) и (8), следует учитывать многоволновую дифракцию для плоских волн типа

$$|\mathbf{k} - N\mathbf{Q}\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{G} - N\mathbf{Q}\rangle, \dots, |\mathbf{k}\rangle, \\ |\mathbf{k} + \mathbf{G}\rangle, \dots, |\mathbf{k} + N\mathbf{Q}\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{G} + N\mathbf{Q}\rangle. \quad (10)$$

Поскольку  $\mathbf{Q}\mathbf{u}_0 \ll \mathbf{G}\mathbf{u}_0$ , в матрице гамильтониана будут доминировать члены с  $J_n\{(\mathbf{G} + n\mathbf{Q})\mathbf{u}\}$ . При  $|\mathbf{G}\mathbf{u}_0| \lesssim 1$  функции Бесселя в (8) быстро убывают с увеличением  $|n|$  (для  $|n| > 6 J_n(1) \lesssim 10^{-6}$ ), и для упорядоченной системы базисных функций (10) матрица (4) будет иметь ленточную структуру с элементами  $J_n\{(\mathbf{G} + n\mathbf{Q})\mathbf{u}\} \omega(\mathbf{G} + n\mathbf{Q})$  вблизи диагонали.

Для одновалентного ОЦК металла был проведен расчет электронного спектра в окрестности центра грани зоны Бриллюэна при распространении

продольной и поперечной УЗ волн (использовались параметры, соответствующие литию при  $T \approx 70$  К). Соотношение (2) будет выполняться для образцов с  $l \sim 10^{-5}$  см при частотах  $10^{10} \leq \omega \leq 10^{11}$  гц. Для различных  $u_0$  в диапазоне  $0 - 0,5$  Å вычислялись собственные значения симметричных ленточных матриц (4), соответствующих набору плоских волн (10), путем приведения матриц к трехдиагональному виду и последующего применения QL — алгоритма [11]. Численные расчеты на ЭВМ обеспечивали сходимость  $\leq 1$  мридб при размерности матриц  $N \geq 200$  и позволили установить следующее. При возбуждении в металлическом монокристалле УЗ с частотой, удовлетворяющей условию (2), и амплитудой  $u_0 \geq 0,1$  Å происходит заметная перестройка электронного спектра вблизи брэгговских плоскостей, соответствующих  $G$ , квазиколлинеарным с  $u_0$  (рисунок). На сверхструктурных брэгговских плоскостях  $G \pm nQ$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) появляются расщепления в спектре  $10^{-6} \leq \epsilon_{nQ} \leq 10^{-3}$  ридб, убывающие с увеличением  $n$  (т. е. при удалении от центра грани зоны Бриллюэна). Эти расщепления определяются матричными элементами  $J_n\{(G + nQ)u\}$  и  $(G + nQ)$  в (4), соответствующими переходам типа процессов переброса, и поэтому проявляются как для продольной, так и для поперечной УЗ волны и существенно превышают значения  $\epsilon_Q$  вблизи дна зоны проводимости. Такие расщепления могут приводить к ряду эффектов, предсказанных в [2], и их экспериментальное обнаружение представляется возможным в монокристаллических металлах при наличии достаточно мощного УЗ.

Энергетический зазор в спектре для электронных состояний в центре грани зоны Бриллюэна определяется главным образом матричным элементом  $J_0(Gu)\omega(G)$  и заметно уменьшается с увеличением амплитуды  $u_0$  (таблица). Подоб-

ная перестройка электронного спектра происходит и при воздействии тепловых фононов. В пренебрежении процессами некогерентного рассеяния электронов на колеблющейся решетке влияние температуры на спектр можно формально учесть, введя фактор Дебая—Валлера в фурье-компоненты псевдопотенциала [12, 13]:  $\omega(G) \exp(-M(G, T))\omega(G)$ . Демпфирующее действие фактора Дебая—Валлера на матричные элементы псевдопотенциала в области высоких температур приближает спектр к параболическому. В настоящей работе показано, что аналогичный эффект может быть получен и при низких температурах путем возбуждения мощной УЗ волны. Экспериментальное обнаружение этого эффекта представляется возможным при исследовании изменений структуры оптических полос поглощения, а также с помощью метода фотоэмиссии с угловым разрешением [14].

Зависимость энергетического зазора в точке симметрии $N$ зоны Бриллюэна лития от амплитуды поперечной ультразвуковой волны ( $\epsilon_G$ — в ридбергах, $u_0$ — в Å)	
$u_0$	$\epsilon_G$
0	0,200
0,1	0,197
0,2	0,187
0,3	0,172
0,4	0,151
0,5	0,124

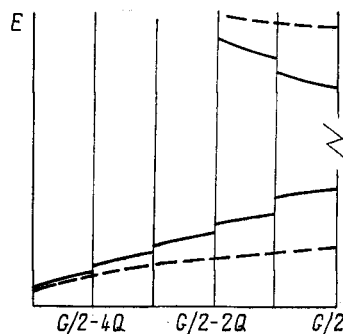


Схема перестройки электронного энергетического спектра непереходного металла в окрестности центра грани зоны Бриллюэна при воздействии мощной ультразвуковой волны (пунктирная линия соответствует невозмущенному спектру).

Автор глубоко признателен И. В. Свечкареву за внимание к работе и полезные обсуждения.

G. E. GRECHNEV

EFFECT OF HIGH INTENSITY ULTRASOUND ON BAND  
STRUCTURE OF METALS

(Short note)

The band structure of the nontransition metal electron spectrum is calculated by the pseudopotential method in the presence of a standing ultrasonic wave. It is found that near the Brillouin zone faces the superstructural splittings in the spectrum induced by an additional long period are governed by the Umklapp-time electron transitions and significantly exceed «sonic» gaps near the conduction zone bottom. The main energy gaps on the Bragg planes corresponding to the reciprocal lattice vectors  $G$ , which are quasi-collinear with respect to the sound amplitude  $u_0$ , decrease essentially as  $u_0$  increases.

## LIST OF SYMBOLS

$l$ , electron mean free path;  $k$ , electron wave number;  $Q$ , ultrasound wave vector;  $u_0$ , ultrasound deformation amplitude;  $G$ , reciprocal lattice vector;  $v_F$ , Fermi velocity;  $v$ , ultrasound velocity;  $\omega$ , ultrasound frequency;  $E(k)$ , energy of electronic state;  $w$ , pseudopotential.

## FIGURE CAPTION

Reconstruction scheme of electron energy spectrum of a nontransition metal in the vicinity of the Brillouin zone face under effect of high-intensity ultrasound wave. (The dashed line corresponds to a nonperturbed spectrum).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Келдыш Л. В. О влиянии ультразвука на электронный спектр кристалла.—ФТТ, 1962, 4, № 8, с. 2265—2267.
2. Изменение топологии поверхности Ферми в кристаллах с дополнительным длинным периодом и некоторые связанные с этим эффекты / Н. Б. Брандт, Э. Р. Иоон, С. М. Чудинов, Г. Д. Яковлев — Письма в ЖЭТФ, 1972, 15, вып. 4, с. 204—207.
3. Лайтман Б. Д., Погорельский Ю. В. Влияние звуковой запрещенной зоны на поглощение звука и акустоэлектрический ток в полупроводниках и полуметаллах.—ФТТ, 1973, 15, № 12, с. 3625—3633.
4. Каган Ю., Пушкарёв В. В., Холас А. Влияние зонной структуры электронов проводимости на фоновый спектр металлов.—ЖЭТФ, 1983, 84, вып. 4, с. 1494—1510.
5. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И. Электронная теория металлов.—М.: Наука, 1971.—416 с.
6. Бровман Е. Г., Каган Ю. М. Фононы в непериодических металлах.—УФН, 1974, 112, вып. 3, с. 369—426.
7. Займан Дж. Обычные явления переноса в металлах.—В кн.: «Физика металлов». I. Электроны.—М.: Мир, 1972, с. 282—314.
8. Займан Дж. Принципы теории твердого тела.—М.: Мир, 1974.—472 с.
9. Grimwall G. The electron-phonon interaction in normal metals.—Phys. Scr., 1976, N 1/2, p. 63—78.
10. Bateman H. Higher transcendental functions.—New York: McGraw-Hill Book Co., 1953, 2,—396 p.
11. Уилкинсон Дж., Райни К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра.—М.: Машиностроение, 1976.—390 с.
12. Мотулевич Г. П. Зависимость концентрации электронов проводимости металлов от температуры.—ЖЭТФ, 1966, 51, вып. 6, с. 1918—1922.
13. Гречнев Г. Е., Свечкарёв И. В. Влияние температуры на зонную структуру кадмия и бериллия.—ФММ, 1984, 57, вып. 2, с. 238—244.
14. Himpel F. J. Angle-resolved measurements of the photoemission of electrons in the study of solids.—Adv. Phys., 1983, 32, N 1, p. 1—51.

Физико-технический ин-т  
низких температур АН УССР,  
г. Харьков

Получено 27.08.84