

УДК 537.311.31

КОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЙАНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ НА ПОВЕРХНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

Гангмагер В. Ф., Левинсон И. Б.

Результат взаимодействия электрона с поверхностью представляет собой акт рассеяния, вследствие которого меняется объемное состояние свободного электрона. Вероятность того, что электрон с импульсом \mathbf{k} , подлежащий к поверхности ($\mathbf{n}_s \mathbf{v}_k < 0$, \mathbf{n}_s — внутренняя нормаль), перейдет в элемент фазового объема $d^3\mathbf{k}'$ вблизи \mathbf{k}' , обозначим $w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}$. При этом

$$\int_+ d^3\mathbf{k}' w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} = 1. \quad (1)$$

Знак «+» указывает на интегрирование по тем \mathbf{k}' , для которых $\mathbf{n}_s \mathbf{v}_{k'} > 0$. Равенство (1) означает, что столкновение с поверхностью неизбежно в отличие от столкновения с точечными дефектами и фононами, где есть конечная вероятность избежать столкновения. Именно поэтому рассеяние на поверхности не характеризуется временем рассеяния и размерность его характеристик не содержит времени (в отличие от вероятности рассеяния на примесях и фононах).

Характер рассеяния электрона на поверхности определяется ее состоянием. Идеальной называется поверхность, имеющая трансляционную инвариантность с атомным масштабом в двух направлениях вдоль поверхности. Идеальная поверхность рассеивает электроны как бесконечная дифракционная решетка, только в определенных направлениях. Такое рассеяние называется когерентным, его вероятность $w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}^{(c)}$ есть сумма дельта-функций. Идеальная поверхность неподвижна, и рассеяние всегда упруго.

Неидеальность поверхности может быть связана с точечными дефектами — примесными или межузельными атомами, вакансиями. Если таких дефектов нет, поверхность является атомно-чистой. Неидеальность атомно чистой поверхности может быть связана с тем, что она не плоская, а «холмистая», причем высота холмов h и их протяженность L больше атомного размера a_0 . Возможны сочетания обоих типов неидеальности, а также и другие дефекты. Идеальность поверхности может нарушаться и поверхностными колебаниями решетки.

Наличие любых дефектов приводит к некогерентному вкладу в вероятность $w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'}^{(ic)}$, являющемуся гладкой функцией \mathbf{k}' . Некогерентное рассеяние может быть и неупругим — падающий на поверхность электрон может обмениваться энергией с поверхностными колебаниями и примесными атомами. Однако в настоящее время большинство экспериментов описывается в рамках упругого рассеяния и поэтому только оно здесь и рассматривается.

При упругом рассеянии все состояния \mathbf{k}' принадлежат той же энергетической поверхности, что и состояние \mathbf{k} . При квадратичном законе дисперсии они занимают поверхность полусферы $\theta' < \pi/2$ (θ' — угол между \mathbf{k}' и внутренней нормалью к поверхности). Тогда вместо $w_{\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}'} d^3\mathbf{k}'$ удобно ввести вероятность $F(\theta, \varphi, \theta', \varphi') d\omega'$ рассеяния в телесный угол

do' с нормировкой

$$\int_{\theta' < \pi/2} F(\theta, \varphi, \theta', \varphi') do' = 1. \quad (2)$$

Эта функция называется индикатрисой рассеяния. Соответственно вместо функций $w^{(c)}$ и $w^{(inc)}$ можно ввести F_c и F_{inc} .

Для реальной поверхности полная вероятность рассеяния

$$w_{k \rightarrow k'} = w_{k \rightarrow k'}^{(c)} + w_{k \rightarrow k'}^{(inc)}. \quad (3)$$

Величина

$$Q_0(\mathbf{k}) = \int_+ w_{k \rightarrow k'}^{(inc)} d^3k' = 1 - \int_+ w_{k \rightarrow k'}^{(c)} d^3k' \quad (4)$$

называется коэффициентом некогерентности рассеяния, она пропорциональна степени дефектности поверхности. Величина $P_0 = 1 - Q_0$ называется коэффициентом когерентности.

Другой интегральной характеристикой рассеяния является коэффициент транспортной диффузности рассеяния Q_1 , определяемый равенством

$$k_{\parallel} Q_1 = \int_+ w_{k \rightarrow k'} (\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel}) d^3k', \quad (5)$$

который описывает темп потери компоненты импульса k_{\parallel} , параллельной поверхности. Величину $P_1 = 1 - Q_1$ мы будем называть коэффициентом транспортной зеркальности (см. также [1]).

Кинематика. Рассмотрим отражение электронов от поверхности, совпадающей с одной из атомных плоскостей S и не содержащей никаких элементов случайности. Обозначим векторы ее элементарных трансляций через α_1 и α_2 , обратные векторы — через β_1 и β_2 ($\beta_1 \perp \alpha_2$, $\beta_2 \perp \alpha_1$). Законы сохранения при отражении от такой поверхности имеют вид

$$\varepsilon(\mathbf{k}') = \varepsilon(\mathbf{k}), \quad (6)$$

$$\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \beta, \quad (7)$$

где k_{\parallel} , k'_{\parallel} — компоненты векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' , параллельные поверхности; β — произвольный вектор обратной решетки:

$$\beta = t_1 \beta_1 + t_2 \beta_2 \quad (8)$$

(t_1 и t_2 — целые числа). Для состояния отраженного электрона, кроме того, должно быть выполнено неравенство

$$v_z(\mathbf{k}') > 0 \quad (9)$$

(ось z направлена по внутренней нормали к поверхности). Отражение, происходящее в соответствии с выражениями (6) — (9), является когерентным.

Допустим сначала, что никакой перестройки атомов вблизи поверхности не произошло и атомная плоскость на поверхности сохранила свою естественную симметрию, т. е. что все атомы на ней и вблизи нее находятся на тех же местах, какие они занимали бы, находясь внутри кристалла. Тогда все векторы \mathbf{b} объемной обратной решетки, спроектированные на поверхность, переходят в векторы β поверхностной решетки (множество векторов β двумерно, а множество векторов \mathbf{b} трехмерно, однако среди векторов \mathbf{b} есть семейство $t\mathbf{b}_s$ ($t = \pm 1, \pm 2, \dots$) векторов, перпендикулярных поверхности S ; это накладывает на проекции одно дополнительное соотношение). Справедливо и обратное утверждение: каждый вектор β поверхностной решетки есть проекция на плоскость S некоторого семейства векторов \mathbf{b} .

В простейшем случае, когда в плоскости S лежат два обратных вектора объемной решетки $\mathbf{b}_1 \parallel \mathbf{b}_2$, их можно выбрать в качестве β_1 и β_2 :

$$\beta_1 = \mathbf{b}_1, \quad \beta_2 = \mathbf{b}_2, \quad \mathbf{b}_3 \perp S. \quad (10)$$

Тогда, поскольку \mathbf{k} и \mathbf{k}' определены с точностью до \mathbf{b} , в равенстве (7) можно положить $\beta = 0$ и оно переходит в обычный закон сохранения тангенциальной компоненты импульса. Однако даже этот простейший случай при сложном законе дисперсии может привести к многоканальности в когерентном отражении. Для примера обратимся к рис. 1, a — e , где изображена поверхность Ферми (пФ) некоторого гипотетического металла с

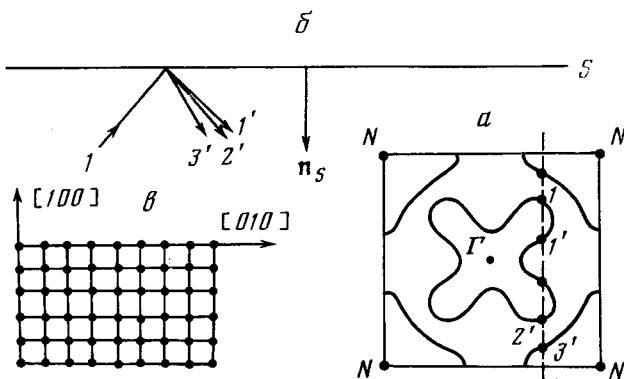


Рис. 1. Отражение электронов от поверхности $S \parallel (100)$ простой кубической решетки. a — зБ с двухлистной пФ (поверхность с центром в Γ — электронная, с центром N — дырочная); b — векторы скорости электронов в состояниях $I, I', 2'$ и $3'$; e — простая кубическая решетка

простой кубической решеткой. Пусть электрон, двигающийся к поверхности, находится в точке I зоны Бриллюэна (зБ). После отражения он должен остаться на прямой $\mathbf{k}'_{\parallel} = \text{const}$, проходящей через точку I и параллельной вектору \mathbf{n}_s . Эта прямая пересекает пФ шесть раз, причем в трех точках ($I', 2'$ и $3'$) вектор скорости направлен от поверхности. Это означает, что законы сохранения энергии и квазиимпульса допускают три состояния когерентно рассеянного электрона. Отраженное состояние $3'$ можно условно считать отражением с междолинным переходом, поскольку оно находится на другом участке многосвязной пФ (на рис. 1, a этот участок дырочный). Количество состояний, удовлетворяющих уравнениям (6) и (7), всегда четно. Их можно разбить на пары, в каждой из которых одно состояние удовлетворяет условию (9), а другое — нет. Если при данном начальном состоянии имеется лишь одно конечное, то когерентное рассеяние называется одноканальным. При квадратичном законе дисперсии одноканальное отражение происходит в соответствии с правилом «угол падения равен углу отражения», поэтому одноканальное рассеяние мы будем также называть зеркальным. Иногда этот термин применяют также и ко всякому когерентному рассеянию.

Многоканальность рассеяния, обусловленная сложным законом дисперсии, присуща не только металлам, но также и полуметаллам и полупроводникам. Например, в германии при отражении от поверхности $S \parallel (100)$ помимо внутридолинных электронных переходов допустимы когерентные переходы из электронной долины, лежащей на оси $[111]$, в долину на оси $[\bar{1}\bar{1}1]$, а от поверхности (110) — из долины $[111]$ в долину $[\bar{1}\bar{1}1]$.

Случай (10), изображенный на рис. 1, весьма специфичен. Кристаллов с простой кубической решеткой в природе нет, а ни в гранецентрированной, ни в объемно-центрированной решетках нет плоскостей, на которых

бы выполнялись все условия (10). Иногда этот случай все же реализуется. Условиям (10) удовлетворяет, например, в гексагональном кристалле плоскость, перпендикулярная оси C_6 . В большинстве же случаев даже на поверхностях с малыми индексами высокосимметричных кристаллов в плоскости S не оказывается двух неколлинеарных векторов \mathbf{b} . Тогда в уравнении (7) уже нужно принимать во внимание наличие β и наряду с отражениями $\beta=0$ рассматривать и дифракционные, с $\beta \neq 0$.

Проиллюстрируем это опять на простейшем примере простой кубической решетки с плоскостью $S \parallel (110)$ (рис. 2, $a-e$). Период поверхностной решетки теперь в 2 раза больше, чем расстояние между эквивалентными

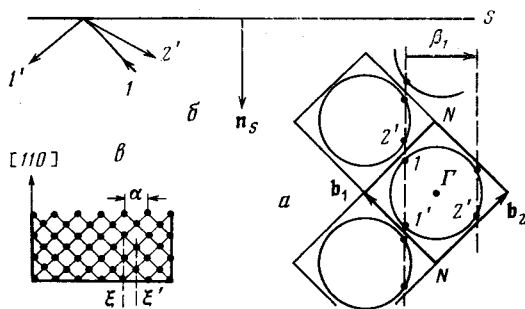


Рис. 2. Отражение электронов от поверхности $S \parallel (110)$ простой кубической решетки; α — период поверхностной решетки. a — сферическая пФ в схеме повторяющихся зон; b — схема отражения электронов; e — простая кубическая решетка

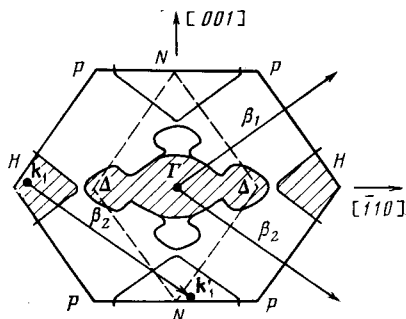


Рис. 3. Сечение зБ объемно-центрированной кубической решетки плоскостью (110), проходящей через точку Γ . Показана пФ вольфрама (или молибдена) без эллипсоидов

в объеме плоскостями ξ и ξ' . Соответственно вектор β_1 в 2 раза меньше максимального размера элементарной ячейки в направлении β_1 , построенной на векторах $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$. Теперь на прямых $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}$ и $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} + \beta_1$ лежат физически различные состояния. Чтобы подчеркнуть, что наличие нескольких отраженных волн обусловлено теперь именно дифракцией на поверхности, а не сложным электронным спектром, на рис. 2, a изображена сферическая пФ. Электрон, подлетающий к поверхности в состоянии I , может отразиться в состоянии I' и $2'$ (рис. 2, b).

Отметим, что дифракции может не быть, даже если она и допускается симметрией. Например, если бы диаметр ферми-сферы на рис. 2, a был меньше $\beta_1 = \mathbf{b}_1/2$, то возможен был бы лишь переход $I \rightarrow I'$.

Как видно из рис. 2, существование перехода $I \rightarrow 2'$ можно объяснить, и не прибегая к понятию дифракции. Если воспользоваться схемой повторяющихся зон, то состояние $2'$ оказывается на прямой $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}$. Таким образом, состояние $2'$ можно рассматривать либо как результат дифракции первого порядка на поверхностной решетке, либо как результат процесса переброса на вектор объемной обратной решетки \mathbf{b}_1 . Эта неоднозначность в интерпретации объясняется отмечавшейся выше связью между векторами \mathbf{b} и β .

Если на поверхности имеет место перестройка атомов, то дифракцию на поверхностной решетке не удастся свести целиком к процессам переброса. Например, если атомы верхнего слоя на рис. 2 сближаются попарно, то период α увеличится в 2 раза, вектор β_1 в 2 раза уменьшится и уравнение (7) будет удовлетворяться уже не на двух, а на четырех вертикальных линиях, пересекающих зБ. Отражением с перебросом при этом можно будет назвать только дифракционное отражение второго порядка.

Состояния на прямой ΓN обратного пространства на рис. 2 обладают особым свойством: процессы переброса (или дифракции на вектор β_1) не дают для них физически новых конечных состояний. В более сложных

случаях таким свойством обладают трехмерные области зБ. Рассмотрим, например, важный для эксперимента случай объемно-центрированной решетки. На рис. 3 изображено центральное сечение зБ плоскостью (110) вместе с векторами β_1 и β_2 — вид со стороны поверхности кристалла. Если k_{\parallel} находится внутри ромба, выделенного в зБ пунктиром, то концы всех векторов $\pm\beta_1$, $\pm\beta_2$ оказываются за пределами зБ. Поэтому область внутри цилиндра с осью вдоль [110] и ромбом $N\Delta N\Delta$ в сечении не дает дифракционных отражений. В то же время допустим, например, переход из k к k' . В W и Mo это означает возможность отражения с дырочной поверх-

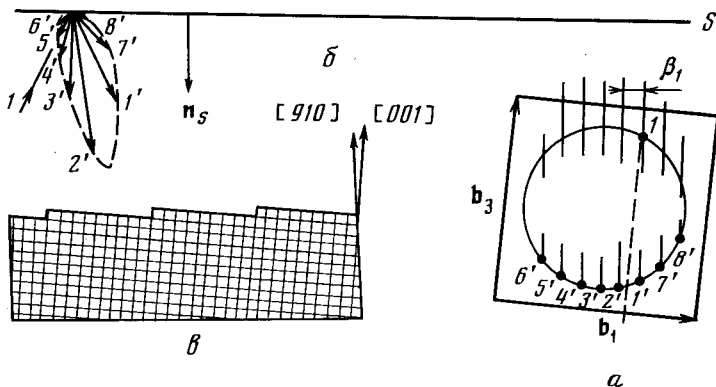


Рис. 4. Отражение электронов на сферической пФ от поверхности $S \parallel (910)$ простой кубической решетки (а, е). β — длины векторов $1' - 8'$, направленных вдоль направлений скоростей отраженных электронов, соответствуют вероятности отражения в данном направлении

ности H на некоторые из эллипсоидов N (мы пользуемся обычными обозначениями отдельных листов пФ этих металлов при помощи букв, обозначающих находящиеся внутри этих листов высокосимметричные точки зБ).

Вероятности переходов. Изложенные выше соображения можно назвать кинематикой когерентного рассеяния на поверхности, поскольку они лишь классифицируют возможные состояния когерентно-отраженных электронов, не затрагивая вероятностей переходов в эти состояния. В общем случае эти возможности можно записать в виде матрицы, порядок которой, равный количеству пар состояний, удовлетворяющих уравнению (7), зависит от k_{\parallel} . Каждый элемент w_{kp} есть вероятность перехода из нештрихованного состояния k в штрихованное p .

Иногда кое-что о соотношении между w_{kp} можно сказать и из кинематических соображений. На рис. 4 приведен пример поверхности с большими индексами. Такие поверхности описываются решетками с большими периодами α и соответственно с малыми β . Тогда на пФ может оказаться много дифракционных отражений (естественно, что их можно интерпретировать и как рассеяние с перебросом).

При уменьшении угла η между нормально n_s и кристаллографическим направлением с малыми индексами (в нашем примере [001]) период дифракционной решетки увеличивается. Формально одновременно увеличивается также и число дифракционных отражений. Однако при этом все более длинные участки представляют собой идеальную поверхность (001), поэтому все большая относительная интенсивность должна сосредотачиваться в тех дифракционных максимумах, которые ближе всего к состоянию, соответствующему отражению от наклонно расположенной поверхности (100) [на рис. 4 это отражения $2'$ и $1'$].

Конкретных расчетов вероятностей w_{kp} пока не существует. Некото-

рые общие закономерности можно сформулировать, лишь когда начальное и конечное состояния близки, т. е. принадлежат одной энергетической полосе и расстояние q между ними в обратном пространстве мало [2, 3]:

$$qa_0 \ll 1. \quad (11)$$

Такой парой, например, можно считать состояния I и I' на рис. 1. Чем меньше q , тем меньше компонента скорости v_x у этих электронов, поэтому они называются скользящими. Условие (11) может выполняться для всех внутримолекулярных переходов малой группы носителей, а также и для внутримолекулярного перехода с перебросом типа $I \rightarrow 2'$ на рис. 2.

Малость передаваемого импульса q в этом канале когерентного отражения означает, что точное положение границы в пределах элементарной ячейки несущественно. Это позволяет заменить реальный потенциал на поверхности бесконечной стенкой и сформулировать граничное условие для волновой функции в виде $\psi=0$. Это в свою очередь означает, что канал с малой передачей импульса в отражении доминирует, т. е. $w_{11} \approx 1$, и волновая функция у поверхности имеет вид стоячей волны. В этих условиях рассеяние практически когерентно. По мере увеличения передаваемого импульса (для скользящих электронов это соответствует увеличению угла скольжения $\varphi = \pi/2 - \theta$) условие $\psi=0$ все меньше соответствует условиям задачи. Одновременно все более разнятся волновые функции в состояниях I и I' — стоячая волна портится и включаются другие каналы когерентного отражения. Задача о вычислении коэффициента отражения при малом передаваемом импульсе q может быть решена в общем виде (см., например, [1, 2]). Отражение в канал с малым q действительно оказывается основным, и отличие от единицы вероятности w_{11} такого отражения пропорционально q . Для скользящих электронов отличие w_{11} от единицы оказывается поэтому пропорциональным углу φ , под которым электрон подлетает к поверхности:

$$w_{11} = 1 - \gamma\varphi. \quad (12)$$

При выводе этой формулы полная идеальность поверхности не предполагалась, так что член $\gamma\varphi$ включает в себя не только вероятность отражения в другие когерентные каналы, но и вероятность некогерентного отражения.

Магнитные поверхностные уровни. Для наблюдения когерентного рассеяния нужно выделить такие физические явления, которые принципиально обусловлены именно когерентной частью рассеяния на поверхности. Первым таким экспериментом было наблюдение осцилляции поверхностного импеданса металлов в слабых магнитных полях [4, 5], обусловленных резонансным поглощением электронов, находящихся на магнитных поверхностных уровнях [6].

Условия квантования Бора — Зоммерфельда площади электронной орбиты в магнитном поле, приводящие в безграничном металле к ландаускому спектру, применимы и к электрону, движущемуся в тонкой пластине с идеально отражающими стенками [7]. В случае электрона на пФ с квадратичным законом дисперсии $\epsilon_F = \hbar^2 k^2 / 2m$, движущегося вблизи одной поверхности по дуге окружности радиуса $R = v_x / \Omega$, $\Omega = eH / (mc)$ с центром вне металла и периодически зеркально от нее отражающегося под малым углом φ , спектр приобретает вид

$$\epsilon_l(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) + \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \left[\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} (l\hbar\Omega)^2 \right]^{1/3}, \quad l=1, 2, \dots; \quad (13)$$

k_y — компонента волнового вектора, описывающая движение вдоль поля, k_x связана с z -координатой центра орбиты, $k_x \approx k_F$, а целое число l есть число квантов магнитного потока через сегмент, стягиваемый дугой, по которой движется электрон двумя отражениями от поверхности (рис. 5, а).

Когда на металл падает электромагнитная волна с частотой ω , удовлетворяющей условию

$$\omega = \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} \left(\frac{\Omega^2 \epsilon_F}{\hbar} \right)^{1/3} (l_1^{2/3} - l_2^{2/3}), \quad (14)$$

то происходят резонансные переходы между уровнями с разными l при сохранении k_x, k_y , которые наблюдаются в виде узких линий в импедансе.

Обычно резонансы на поверхностных уровнях наблюдаются в полях 1—50 Э. Таким значениям магнитного поля соответствуют углы $\varphi \approx 10^{-2} - 10^{-3}$, т. е. электроны действительно являются скользящими (рис. 5, б). При этом электроны все время должны отражаться лишь в

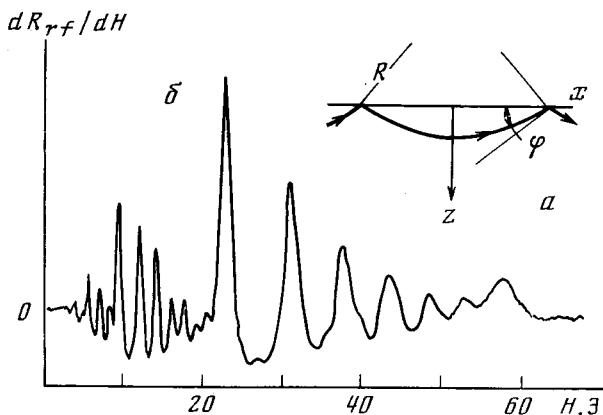


Рис. 5. Резонансы на магнитных поверхностных уровнях меди (б). Частота 36 ГГц, $S \parallel (100)$, $H \parallel [100]$, $T \approx 4,8$ К. R_{rf} — действительная часть поверхностного импеданса, I_{rf} — вектор высокочастотного тока [5]. а — квазиклассическая траектория

одно определенное состояние l' , близкое к начальному l , т. е. мы имеем дело с зеркальным каналом отражения.

Относительная ширина линии $\Delta\omega/\omega$ определяется числом циклов, которое электрон проходит по своей траектории без рассеяния:

$$\Delta\omega/\omega = (1 - w_{11}) + (\omega\tau)^{-1}. \quad (15)$$

Из-за наличия члена с τ в равенстве (15), обусловленного столкновениями в объеме, ширина линии определяет лишь нижнюю границу для величины w_{11} .

Большая величина коэффициента когерентности для скользящих электронов довольно естественна (см. выражение (12)). Однако сравнительно недавно был проделан эксперимент [8], в котором удалось наблюдать квантование орбит электронов, когерентно отражающихся от поверхности под большими углами. При измерениях эффекта Шубникова — де Гааза на вискерах (пластинчатых монокристаллах) сурьмы осцилляции поперечного магнетосопротивления были видны в полях, в которых траектория уже заведомо не помещается в пластине.

Поперечная фокусировка. Очень эффективным методом изучения когерентного рассеяния в полуметаллах и металлах является метод поперечной фокусировки [9, 10]. Пусть на поверхности металла установлено два контакта малого диаметра d на расстоянии L друг от друга, на один из них (эмиттер) подано напряжение V_0 . Кроме того, к образцу приложено магнитное поле H , параллельное поверхности и перпендикулярное линии контактов. Напряжение V_0 сосредоточено в малой окрестности эмиттера, что отражается на функции распределения всех электронов, вылетающих из этой окрестности. Вдали от эмиттера функция распределения возмущена

не на всей пФ , а лишь в окрестности тех состояний, в которых находятся электроны, двигающиеся от эмиттера во внешнем магнитном поле H . Другими словами, возмущение локализовано на пФ , а место локализации зависит от расположения точки в кристалле по отношению к эмиттеру. Величина возмущения при движении вдоль электронной траектории уменьшается вследствие рассеяния в объеме кристалла.

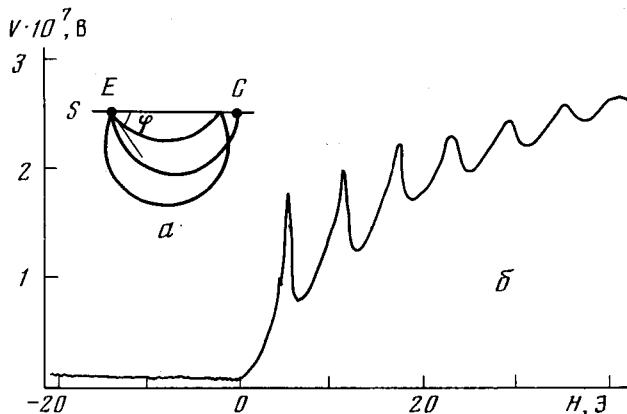


Рис. 6. Зависимость поперечной фокусировки электронов в висмуте от величины магнитного поля (б). Расстояние между контактами $L=0,15$ мм, $L \parallel C_2$, $T=4,7$ К [9]. а — траектории электронов, вылетающих из эмиттера E под разными углами к поверхности, C — коллектор

Пусть спектр электронов квадратичен. Рассмотрим электроны, движущиеся в плоскости, перпендикулярной H . Они столкнутся с поверхностью на расстоянии x от эмиттера:

$$x=2R \sin \varphi \quad [0 \leq x \leq 2R, x(\varphi) = x(\pi - \varphi)], \quad (16)$$

зависящем от угла φ , под которым электрон покидает эмиттер (рис. 6, а). По мере приближения к точке $2R$ число dN сталкивающихся с поверхностью электронов возрастает: $dN \sim dx \operatorname{tg} \varphi$. Предположив, что потенциал на поверхности пропорционален количеству электронов, приходящих из окрестности эмиттера в единицу времени, получим

$$V(x) \sim x(4R^2 - x^2)^{-1/2}, \quad x \leq 2R. \quad (17)$$

Этот потенциал можно измерить с помощью второго контакта (коллектора). Меняя поле H и тем самым масштаб $R \sim H^{-1}$, можно в фиксированной точке x_0 воспроизвести функцию $V(x)$. Пик фокусировки, соответствующий условию $x_0=2R$, возникнет в поле $H_0=2ch_k_F/ex_0$. (Естественно, что обращение $\operatorname{tg} \varphi$ в бесконечность обрывается на размере контактов.)

Если электроны рассеиваются на поверхности когерентно, то, отразившись от поверхности, они вновь сфокусируются в точке $x=4R$, а затем в точке $x=6R$ и т. д. Соответственно на кривой $V(H)$ появятся пики в кратных полях: $H_1=2H_0$, $H_2=3H_0$ и т. д. (индекс при H указывает на количество отражений).

На рис. 6, б приведена запись этого эффекта на висмуте при отражении от тригональной плоскости $n_s \parallel C_2$ (линия $V=\text{const}$ в левой части графика — напряжение на коллекторе при обратном направлении поля H). Отношение амплитуд последовательных пиков A_i/A_{i-1} определяет коэффициент зеркальности при нормальном падении, который на записи рис. 6, б равен 0,75.

Из-за сильной вытянутости электронных пФ в висмуте независимо от направления H электронные траектории лежат в плоскости, перпендикулярной оси эллипсоида C_1 , поэтому в эксперименте, записи которого при-

ведены рис. 6, б, контакты расположены вдоль оси $C_2 \perp C_1$. Линии поперечной фокусировки на плоскости $n_s \parallel C_3$ наблюдались, однако, и при $L \parallel C_1$ [11]. В рамках изложенных здесь представлений эти линии можно естественно объяснить, лишь предположив наличие когерентного отражения с вектором $\beta = 1/2b_{C_2}$ в условии (7): электрон движется по поверхности одного эллипсоида, когерентно рассеявшись, переходит на другой, проходит пол-оборота по нему и потом попадает на коллектор. Проекция его траектории на поверхность кристалла выглядит как два отрезка, образующие вместе с линией контактов равносторонний треугольник. Однако атомная плоскость, перпендикулярная C_3 , не имеет такого вектора β . Поэтому описанный когерентный переход возможен лишь в случае перестройки атомов на поверхности. Пока нет никаких независимых данных о такой перестройке.

Размерный эффект. В экспериментах с магнитными поверхностными уровнями и с поперечной фокусировкой непосредственно измеряется возможность перехода в одном из каналов когерентного отражения. Вместе с тем ценная информация о когерентном рассеянии и, в частности, многоканальности этого рассеяния получена из измерений коэффициента транспортной диффузности (5). Поскольку интересующие нас сейчас величины $w_{k \rightarrow k'}^{(c)}$ входят в равенство (5) в подинтегральную функцию наряду со вкладом от некогерентного рассеяния, эти методы изучения когерентного рассеяния являются в каком-то смысле косвенными.

Самый известный метод из них — это размерный эффект, т. е. измерение удельной проводимости тонких металлических пластин σ , которая возрастает по мере уменьшения их толщины d . Это возрастание по сравнению с объемной удельной проводимостью σ_0 нашло объяснение в широко известной теории Фукса [12], который учел вклад рассеяния на поверхности в электросопротивление тонкой пластины, введя макроскопический параметр диффузности Q_F . Это позволило сформулировать простейшие граничные условия для уравнения Больцмана и вычислить проводимость тонкой пластины конечной толщины d . В предельном случае $d \gg l$, где l — длина свободного пробега в объеме, проводимость равна

$$\sigma/\sigma_0 = 1 - \frac{3}{8} \frac{l}{d} Q_F. \quad (18)$$

Обычно, хотя и не всегда, параметр Q_F — это усредненный по всем падающим на поверхность электронам коэффициент $Q_i(k)$, введенный в равенство (5). В частности, все процессы когерентного рассеяния, которые сопровождаются дифракцией на поверхностной решетке (или, что то же самое, перебросами в объемной решетке) диссипируют импульс, приобретаемый системой от электрического поля, и потому приводят в соответствии с равенством (5) к релаксации тока [4].

Для справедливости последнего утверждения важно, чтобы когерентные столкновения с двумя противоположными поверхностями пластины не были скоррелированы между собой, т. е. чтобы между ними произошло хотя бы одно столкновение в объеме, которое обеспечило бы сбой фазы волновой функции. В противном случае вместо обычной блоховской функции типа $u_k(r) e^{ikr}$ в пластине возникнет другое стационарное состояние электрона — стоячая волна, и рассуждения о сохранении или несохранении импульса при когерентном рассеянии потеряют силу. Это является следствием того, что когерентное отражение от поверхности является, по существу, псевдорассеянием в том смысле, что процесс отражения происходит в идеально периодическом кристалле, потенциал которого не содержит элементов случайности, поэтому когерентное рассеяние на поверхности вносит вклад в проводимость лишь при совместном действии с обычным рассеянием.

В некоторых случаях в параметр Q_F могут давать вклад и такие коге-

рентные отражения, которые не вносят вклад в равенство (5). Например, в компенсированном металле к релаксации тока могут приводить когерентные отражения с $\beta=0$, которые связывают электронные пФ с дырочными. Эта возможность связана с тем, что в системе с носителями разных знаков полный ток I не связан однозначно с полным импульсом P и может быть, что $I \neq 0$, в то время как $P=0$ (ср. с аналогичными эффектами при столкновении носителей разных сортов [13]).

В работе [14] было впервые обращено внимание на то, что пФ у W и Mo такова, что когерентные отражения от поверхности (110) приводят

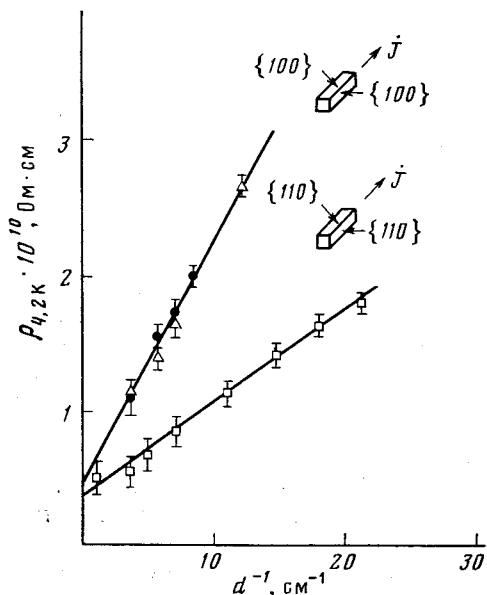


Рис. 7. Зависимость электросопротивления монокристаллических образцов вольфрама квадратного сечения с различной ориентацией граней при одном и том же направлении тока $j \parallel [100]$. $T=4,2$ К. Разные значки на верхней прямой относятся к разным образцам, демонстрируя воспроизводимость результатов [15]

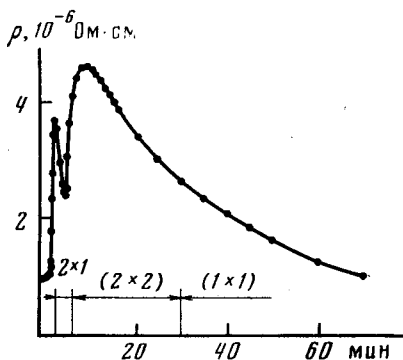


Рис. 8. Зависимость поперечного магнетосопротивления при $T \approx 5$ К пластины вольфрама при различном количестве атомов кислорода, осажденных на поверхности $S \parallel (110)$, от времени напыления. Области существования упорядоченных структур определены методом дифракции медленных электронов [19]

к электронно-дырочным переходам, а от поверхности (100) — нет. В этом, по-видимому, состоит объяснение результатов эксперимента [15], приведенного на рис. 7. Образцы W, ориентация которых приведена на вставке, изготовлены одинаковым образом, и есть все основания полагать, что величины Q_0 из выражения (4) у них примерно равны. Вместе с тем величины Q_p , извлекаемые из графиков рис. 7 с помощью формулы (18), на поверхностях (100), несомненно, больше, чем на поверхностях (110).

Статический скин-эффект. Мощный метод исследования рассеяния носителей примесными атомами на поверхности металла основан на явлении, называемом статическим скин-эффектом, — вытеснении постоянного тока к поверхности пластины в сильном магнитном поле [16–18]. В скомпенсированном проводнике с квадратичными законами дисперсии у электронов и у дырок в классически сильном магнитном поле, параллельном поверхности, объемная проводимость поперек магнитного поля σ_{xx} мала по сравнению с проводимостью в нулевом поле: $\sigma_{xx} = \sigma_0 (R/l)^2$, где R — ларморовский радиус, а l — объемная длина свободного пробега. Ток поперек магнитного поля обусловлен диффузией центров орбит в результате редких объемных столкновений. В слое же толщиной порядка R вблизи поверхности центры

орбит смещаются гораздо чаще за счет столкновений с поверхностью, поэтому плотность приповерхностного тока j_s может оказаться существенно больше объемной, причем величина j_s зависит от характера рассеяния на поверхности.

Если имеются носители лишь одного знака, то при когерентном и при некогерентном рассеянии носители совершают инфинитное движение вдоль поверхности со средней скоростью порядка v_F [18]. При одноканальном когерентном (т. е. зеркальном) отражении траектория периодическая. При некогерентном — угол отражения случайный, но электрон между последовательными столкновениями с поверхностью смещается все равно в одну и ту же сторону на расстояние порядка ларморовского радиуса R .

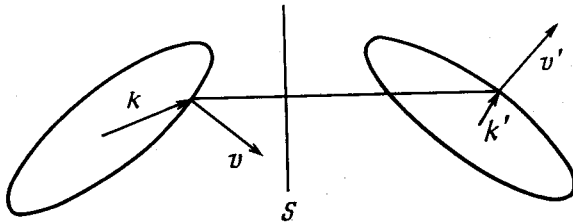


Рис. 9. Когерентное прохождение электрона через границу двух кристаллитов

Таким образом, в обоих случаях движение электрона вдоль поверхности ограничивается объемными столкновениями и эффективная длина пробега $l_{\text{eff}} \approx l$. Если же имеются носители обоих знаков, то при некогерентном рассеянии направление движения вдоль поверхности после столкновения становится случайным, так что $l_{\text{eff}} \approx R$. При когерентном рассеянии l_{eff} зависит от того, допускается ли соотношением (7) электрон-дырочная рекомбинация. Если да (переход $1 \rightarrow 3'$ на рис. 1), то $l_{\text{eff}} \approx R$, если нет, то $l_{\text{eff}} \approx l$. Наличие или отсутствие процессов дифракции само по себе не является в этом случае определяющим фактором.

Как отмечалось выше, когерентное рассеяние на поверхности (110) в вольфраме практически не допускает переходов электрон — дырка. Поэтому стат-скин-эффект в таких образцах очень чувствителен к характеру рассеяния на поверхности и позволяет надежно фиксировать переход от когерентного рассеяния к некогерентному: поперечное магнетосопротивление пластины в сильном поле может измениться в несколько раз (пластины с поверхностью (100), как и следовало ожидать, такой чувствительностью не обладают) [14].

Рассмотрим с этой точки зрения результаты эксперимента [19], в котором на атомно-чистую поверхность (110) кристалла вольфрама напыляли кислород. После напыления на поверхность определенного количества атомов кислорода кристалл охлаждали до 4 К и измеряли поперечное магнетосопротивление в поле ~ 10 кЭ, параллельном поверхности. Время чапыления (рис. 8) характеризует количество атомов кислорода, сорбированное на поверхности, хотя эти величины, вероятно, не пропорциональны друг другу, так как вероятность прилипания падающего на поверхность атома зависит от концентрации уже имеющихся там атомов. Самая правая точка на графике соответствует, по-видимому, монослою атомов кислорода на поверхности. Кривую на рис. 8 можно прокомментировать при помощи рис. 3. Крайняя левая точка кривой (атомно-чистая поверхность) соответствует когерентному отражению носителей от поверхности, причем, согласно рис. 3, переходы электрон — дырка при этом отсутствуют. Появление на поверхности отдельных атомов кислорода вызывает некогерентное рассеяние и вследствие электрон-дырочных переходов на такой поверхности рост магнетосопротивления. Упорядочение атомов кислорода в структуру

(2×1) делает рассеяние снова когерентным. При этом переходы электрон — дырка по-прежнему отсутствуют, хотя один из векторов β поверхностной решетки (рис. 3) уменьшился вдвое ($\beta_1' = \beta_1/2$, $\beta_2' = \beta_2$). Этим объясняется глубокий минимум на кривой. Дальнейшее увеличение концентрации перестраивает атомы на поверхности в решетку (2×2) ($\beta_1'' = \beta_1/2$, $\beta_2'' = \beta_2/2$). Когерентное рассеяние на такой решетке допускает переходы электрон — дырка и потому магнетосопротивление растет. Дальнейшее увеличение концентрации и появление монослоя (1×1) возвращает векторы $\beta_{1,2}$ к прежним значениям и выключает переходы электрон — дырка. Магнетосопротивление также возвращается к исходному значению.

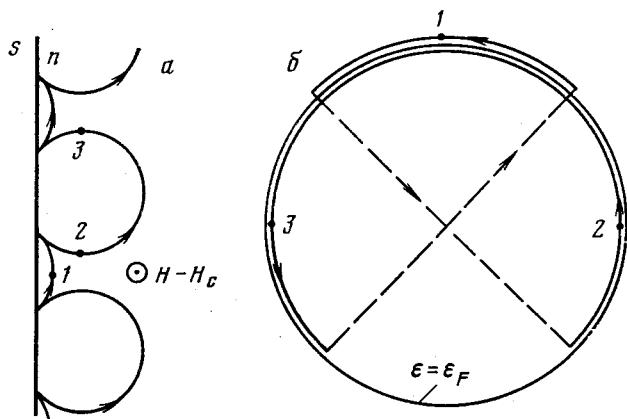


Рис. 10. Траектория электрона, периодически отражающегося от границы между нормальной n и сверхпроводящей s фазами. a — r -пространство, b — k -пространство

На когерентность рассеяния на поверхности, покрытой плотным слоем окисла, указывалось также в работе [20], в которой коэффициент когерентности P_0 измерялся методом поперечной фокусировки. На исходной атомно-чистой поверхности (110) вольфрама удавалось достичь величины $P_0 = 0,6-0,7$; напылением субмолекулярного слоя посторонних атомов его можно было уменьшить до 0,1. В то же время на поверхностях вольфрама, находящихся на открытом воздухе, коэффициент P_0 имеет значение 0,6-0,7.

Межкристаллитные и межфазовые границы. Развитые представления можно использовать для описания рассеяния электронов на плоской регулярной поверхности раздела внутри металла, например на межкристаллитной границе. Помимо когерентного и некогерентного отражения возможно также когерентное и некогерентное прохождение электронов через такую границу. Поскольку по обе стороны границы пФ повернута по-разному, даже простейшее условие $k_{\parallel} = \text{const}$ связывает между собой различные состояния в двух кристаллитах. Сейчас изучение рассеяния на таких границах находится в начальной стадии, поэтому мы не будем обсуждать кинематику когерентного прохождения. Заметим только, что когерентное прохождение через границу с нормалью n_s , направленной вдоль линий тока, не вносит вклад в электросопротивление, несмотря на то, что в этом процессе не сохраняется именно та компонента импульса, которая приобретает системой от электрического поля. Диссипации полного импульса не происходит из-за того, что когерентное прохождение связывает между собой лишь состояния с $v_n > 0$ (рис. 9), поэтому антисимметричная добавка к функции распределения не симметризуется.

Упомянем также о границе нормального металла со сверхпроводником. Электрон с импульсом k и энергией $\epsilon = \epsilon_F$, подлетев к такой границе, спари-

вается с электроном ($-k, \epsilon_F - \epsilon$), и образовавшаяся пара уходит в сверхпроводник [21], поэтому электрон ($k, \epsilon - \epsilon_F$) отражается в виде дырки ($-k, \epsilon_F - \epsilon$). (Смысл термина «дырка» здесь в том, что возмущение функции распределения, носителем которого был подлетевший к границе электрон, смещается из области $\epsilon - \epsilon_F > 0$ в область $\epsilon - \epsilon_F < 0$ или наоборот.) Само наличие межфазной границы означает, что в нормальной фазе имеется магнитное поле, параллельное границе и равное по величине критическому полю H_c . Траектории электрона в этом поле в импульсном и координатном пространствах при сферической пФ показаны на рис. 10. Экспериментально отражение от границы со сверхпроводником наблюдалось при помощи радиочастотного размерного эффекта [22].

ЛИТЕРАТУРА

1. Окулов В. И., Устинов В. В. Физ. низк. темп., 1979, т. 5, с. 213.
2. Андреев А. Ф. Успехи физ. наук, 1971, т. 105, с. 113.
3. More R. M. Phys. Rev., 1974, B9, p. 392.
4. Хайкин М. С. Успехи физ. наук, 1968, т. 96, с. 409.
5. Dorezeta R. E., Koch J. F. Phys. Rev., 1972, B5, p. 3866.
6. Nee T. W., Prange R. E. Phys. Lett., 1967, v. A25, p. 582.
7. Косевич А. М., Лифшиц И. М. Ж. эксп. теор. физ., 1955, т. 29, с. 743.
8. Гайдуков Ю. П., Голямина Е. М. Ж. эксп. теор. физ., 1978, т. 74, с. 1936.
9. Цой В. С. Письма в ЖЭТФ, 1974, т. 19, с. 114.
10. Цой В. С., Цой Н. П. Ж. эксп. теор. физ., 1977, т. 73, с. 289.
11. Цой В. С., Колесниченко Ю. А. Ж. эксп. теор. физ., 1980, т. 78, с. 2041.
12. Fuchs K. Proc. Cambr. Phil. Soc., 1938, v. 34, p. 100.
13. Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б. Ж. эксп. теор. физ., 1978, т. 74, с. 261.
14. Луцишин П. П., Панченко О. А., Харламов А. А. Ж. эксп. теор. физ., 1973, т. 64, с. 2148.
15. Старцев В. Е., Дякина В. П., Черепанов В. И., Волкеништейн Н. В., Насыров Р. Н., Манаков В. Г. Ж. эксп. теор. физ., 1980, т. 79, с. 1335.
16. Азбель М. Я. Ж. эксп. теор. физ., 1963, т. 44, с. 983.
17. Песчанский В. Г., Азбель М. Я. Ж. эксп. теор. физ., 1968, т. 55, с. 1980.
18. Копелювич А. И. Ж. эксп. теор. физ., 1981, т. 78, с. 987.
19. Луцишин П. П., Находкин Т. Н., Панченко О. А., Птушинский Ю. Г. Письма в ЖЭТФ, 1980, т. 31, с. 599.
20. Божко С. И., Митряев А. А., Панченко О. А., Разгонов И. И., Цой В. С. Физ. низк. темп., 1979, т. 5, с. 830.
21. Андреев А. Ф. Ж. эксп. теор. физ., 1964, т. 46, с. 1823.
22. Крылов И. П., Шарвин Ю. В. Ж. эксп. теор. физ., 1973, т. 64, с. 946.

Институт физики твердого тела АН СССР,
Черноголовка
Институт теоретической физики
им. Л. Д. Ландау АН СССР,
Черноголовка

Поступила в редакцию
15.I.1982

COHERENT SCATTERING OF CONDUCTION ELECTRONS ON A CRYSTAL SURFACE

Gantmakher V. F., Levinson Y. B.

The multichannel coherent scattering of conduction electrons on an ideal crystal surface is due to the complicated character of the electron energy surface within the first Brillouin zone and to diffraction on the two-dimensional lattice of the surface atomic plane. When there is no surface reconstruction, diffraction processes on the surface are equivalent to umklapp processes on the body atomic lattice. A review is presented of phenomena permitting an experimental study of coherent scattering: magnetic surface levels, Shubnikov-de Haas oscillations in thin plates, transversal focusing, size effect, static skin effect. The features of scattering at the intercrystalline boundaries and at the boundaries between the normal and superconducting phases are briefly discussed.