

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. И. Киселев, В. И. Кононенко, Оценка эффективной массы электронов в цепи
из данных оптического эксперимента,
ТВТ, 2003, том 41, выпуск 6, 870–876

<https://www.mathnet.ru/tvt1725>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и
согласны с пользовательским соглашением

<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.87

16 мая 2025 г., 02:27:18



УДК 669.1:535.331

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ЭЛЕКТРОНОВ В ЦЕРИИ ИЗ ДАННЫХ ОПТИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

© 2003 г. А. И. Киселев, В. И. Кононенко

Институт химии твердого тела УрО РАН, г. Екатеринбург

Поступила в редакцию 23.12.2002 г.

Вид дисперсионной зависимости оптической проводимости жидких редкоземельных металлов (РЗМ) в области энергии фотонов вблизи 2 эВ определяется вкладом максимума плотности электронных состояний, возникающего при брэгговском рассеянии электронов на первой координационной сфере расплава. Показано, что для жидкого церия экспериментальная зависимость оптической проводимости в этой области энергии фотонов может быть описана с учетом эффективной массы электронов, близкой к значению 1.37. Отмечено, что учет эффективной массы электронов в классическом уравнении Друде для оптической проводимости позволяет провести оценку величины этого параметра на основе данных оптического эксперимента.

ВВЕДЕНИЕ

Результаты измерения оптических свойств могут дать важную информацию об энергетической структуре электронов в РЗМ. В ряду редкоземельных элементов увеличение заряда ядра практически не влияет на изменение оптических свойств, так как происходит заполнение электронами 4f-уровней, которые лежат достаточно глубоко и почти полностью экранируются заполненными 5s- и 4p-оболочками, 4f-уровни хорошо локализованы, и их можно рассматривать как атомные. Однако при определении действительного положения 4f-уровней как теория, так и эксперимент дают количественные расхождения [1]. Высказываются соображения о слабости влияния 4f-электронов на свойства коллективизированных электронов, которые происходят от атомных 5d- и 6s-электронов. При анализе данных оптического эксперимента в этом случае начинают играть важную роль не только основное состояние 4f-оболочки, но и ее возбужденные уровни, энергии которых для некоторых РЗМ могут лежать в полосах коллективизированных состояний 5d-, 6s-типов.

В модели почти свободных электронов можно вполне удовлетворительно оценить дисперсионную зависимость оптической проводимости σ в области низких частот. При высоких частотах существенное значение приобретает квантовый характер взаимодействия электромагнитного поля с электронами, находящимися в разнообразных возможных энергетических состояниях, и измерение оптических параметров позволяет получить данные, отражающие особенности как энергетического спектра электронов, так и плотности состояний в пределах некоторого интервала в окрестностях уровня Ферми.

Следует отметить, что более удобно анализировать результаты оптического эксперимента именно для расплавов РЗМ, так как при этом не возникает вопроса о влиянии на оптические свойства магнитного упорядочения. Также исчезает неоднозначность сопоставления экспериментальных данных и правил отбора для электронных переходов в точках симметрии зоны Бриллюэна, установленных с учетом направления поляризации падающего излучения. При изотропности структуры расплава можно достаточно хорошо описывать влияние поверхностных эффектов на оптические свойства металлических систем.

Оптические характеристики жидкого церия в модели почти свободных электронов. Электродинамика сплошных сред при описании электромагнитных процессов в реальных телах не рассматривает детали сложного распределения зарядовой плотности и полей внутри системы ионов и электронов. При этом среда считается электрически квазинейтральной, т.е. обладающей средней плотностью зарядов, равной нулю. Описание такой среды в случае металлических систем практически совпадает с моделью почти свободных электронов.

Поглощение кванта электромагнитного излучения электроном проводимости при этом рассматривается как переход, при котором поглощающий электрон до и после перехода находится в одной зоне. Начальное и конечное состояния связаны непрерывным рядом промежуточных состояний. Эта непрерывная последовательность состояний, пробегаемых электроном в зоне, позволяет трактовать такой переход как ускорение свободного электрона в высокочастотном электрическом поле световой волны. В приближении времени релаксации, не зависящем от энергии,

движение носителей заряда под действием внешней силы эквивалентно движению в вязкой среде с коэффициентом трения $1/\tau$ [2], где τ – время релаксации. Для того чтобы сравнивать коэффициент трения с круговой частотой света, его записывают в виде $1/\tau = \omega_0$. Таким образом, для решения проблемы переноса заряда под действием внешней силы были записаны уравнения Друде–Зинера для действительной ϵ_1 и мнимой ϵ_2 частей диэлектрической проницаемости

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \omega_0^2}, \quad (1)$$

$$\epsilon_2 \omega = 4\pi\sigma = \frac{\omega_0 \omega_p^2}{\omega^2 + \omega_0^2}, \quad (2)$$

где ω_p – частота плазменных колебаний в газе электронов. В области низких частот уравнения Друде–Зинера вполне удовлетворительно описывают характер частотной дисперсии оптических параметров РЗМ [3]. По сравнению с твердыми металлами для расплавов эта область расширена в сторону видимого спектра.

Величина плазменной частоты в модели Друде [4] определяется из уравнения

$$\omega_p^2 = 4\pi e^2 N_e / m_e, \quad (3)$$

в котором e и m_e – заряд и масса электрона. Концентрация электронов проводимости $N_e = z/\Omega$ определяется через валентность z и атомный объем Ω .

Расчитанная по уравнению (3) плазменная частота жидкого церия приведена в табл. 1. Значение валентности принималось равным трем. Атомный объем был получен из экспериментальных данных по плотности жидких РЗМ [5]. В табл. 1 приведены также величины плазменных частот, рассчитанные из результатов эллипсометрического эксперимента [6]. Видно, что значение плазменной частоты жидкого церия, полученное из оптического эксперимента, близко к расчетному.

Заметим, что в предельном случае постоянно поля, когда $\omega = 0$, оптическая проводимость σ превращается в статическую проводимость

$$\sigma(0) = \frac{N_e e^2}{m_e \omega_0}. \quad (4)$$

В качестве первого приближения при оценке частоты релаксации используем значения, рассчитанные по уравнению (4), в котором удельное электросопротивление ρ определяется по экспериментальным данным [7]. Эта частота релаксации также приведена в табл. 1.

На рис. 1 для расчетных значений частоты релаксации и плазменной частоты приведена дисперсионная зависимость для действительной части диэлектрической проницаемости (кривая 2), рассчитанная по уравнению (1) с частотой релаксации, вычисленной по уравнению (4) – 2 и по уравнению (5) – 3.

Таблица 1. Плазменные частоты ω_p , электросопротивление ρ и частоты релаксации ω_0 жидкого церия

Металл	$\omega_p \times 10^{-16}, \text{c}^{-1}$		$\rho \times 10^8, \text{Ом м}$	$\omega_0 \times 10^{-15}, \text{c}^{-1}$	
		[6]	[7]		[6]
Ce	1.6394	1.6575	127	3.02	3.6

вая 2), рассчитанная по уравнению Друде–Зинера (1). Из рисунка видно, что для инфракрасной области спектра (для длины волны λ более 1 мкм) дисперсионные зависимости, полученные из эллипсометрического эксперимента [6] и рассчитанные в приближениях Друде–Зинера с частотой релаксации, вычисленной из статической проводимости, существенно расходятся.

Значение частоты релаксации в работе [6] (см. табл. 1) определялось по соотношению [8]

$$\omega_0 = \frac{3.77 \times 10^{15}}{\lambda} \frac{nk}{1+k^2-n^2}, \quad (5)$$

где показатель преломления n и коэффициент поглощения k в инфракрасной области спектра получены из экспериментальных данных. Рассчитанная с этой величиной частоты релаксации дисперсионная зависимость действительной части диэлектрической проницаемости также приведена на рис. 1 (кривая 3). Видно, что для далекой инфракрасной области спектра результаты эксперимента и расчета по уравнению (1) практически совпадают.

Интервал интенсивного поглощения фотонов для жидкого церия находится в полосе длин волн света от 0.5 до 1.7 мкм (см. рис. 1) или в интервале энергии фотонов 0.7–2.5 эВ. Отклонение в поведении составляющих диэлектрической проницаемости в области видимой части спектра от величин, определяемых моделью Друде–Зинера, обычно объясняются индуцированными процессами меж-

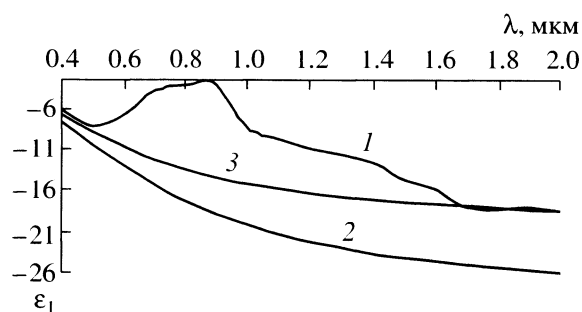


Рис. 1. Дисперсионная зависимость действительной части диэлектрической проницаемости: 1 – из данных эллипсометрического эксперимента [6], оценка ее в приближениях Друде–Зинера (1) с частотой релаксации, вычисленной по уравнению (4) – 2 и по уравнению (5) – 3.

Таблица 2. Электронные характеристики полосы проводимости и восьми межзонных переходов в жидком цери

j	Δ_j , эВ	$\omega_{pj} \times 10^{-15}$, c^{-1}	$\omega_{0j} \times 10^{-15}$, c^{-1}	z_j
0	0	13.112	2.408	1.877
I	0.572	1.514	0.090	0.025
II	0.985	6.046	0.449	0.399
III	1.117	1.280	0.036	0.018
IV	1.211	1.707	0.028	0.032
V	1.711	10.263	0.564	1.150
VI	2.082	2.410	0.193	0.063
VII	2.339	3.093	0.169	0.104
VIII	2.809	4.914	0.312	0.264

зонных электронных переходов. Однако прежде чем использовать соответствующие подходы для определения электронных характеристик таких переходов, необходимо разделить вклады в измеренные оптические постоянные от электронов проводимости и от электронов, участвующих в межполосных переходах.

Связь оптических параметров с характеристиками, используемыми в электронной теории, наиболее подробно рассмотрена для действительной части оптической проводимости σ . Вклады, формирующие экспериментальную зависимость оптической проводимости от энергии фотонов в жидком цери, были представлены в виде суммы вкладов от электронов проводимости и от электронов, участвующих в межзонных переходах

$$\sigma(\omega) = \sum_{j=0}^N \sigma_j(\omega), \quad (6)$$

где N – общее число полос межзонных переходов. Индекс $j = 0$ относится к полосе электронов проводимости, а остальные – к полосам межзонных переходов.

Задача определения парциальных величин аддитивных функций решалась в графическом представлении [9] путем вариационного подбора трех параметров: частоты плазменных колебаний ω_{pj} (аналога высоты пика), положения пика ω_j , где величина щели межзонного перехода $\Delta_j = \hbar\omega_j$ и частоты релаксации ω_{0j} (аналог ширины пика). Для описания экспериментальной кривой световой проводимости жидкого цери достаточно получить электронные характеристики не более десяти вкладов, приведенных в табл. 2.

В работе [9] из правила сумм было записано соотношение для величин парциальных составляющих количества электронов на атом z_j , участвующих

в формировании конкретного вклада в световую проводимость

$$z_j = z\omega_{pj}^2/\omega_p^2. \quad (7)$$

Число валентных электронов z в цери близко к трем. Величины z_j также приведены в табл. 2.

Оптические характеристики жидкого цери при учете эффективной массы электронов. В работе [10] при оценке электронного вклада в энтропию расплавов РЗМ, которая осуществлялась из расчета плотности электронных состояний во втором порядке теории возмущений, вводилось понятие “зонной” эффективной массы электрона в расплаве m^* . Для жидкого цери эффективная масса электронов (в единицах массы электрона) составляла 1.316 [10].

При переходе от модели свободных электронов к более реальной модели металла во многих уравнениях масса электрона, которая присутствует в явном виде, заменяется значением эффективной массы электрона. В частности, уравнение (3) переписывается как

$$\omega_p^2 = 4\pi e^2 N_e/m^*. \quad (8)$$

В дальнейшем для удобства записи уравнений введем безразмерный коэффициент $m_{\text{эф}}$, совпадающий по величине с отношением m^*/m_e . Если обозначить величину плазменной частоты приближений почти свободных электронов как ω_{eP} , то выражение (8) будет иметь вид $\omega_p^2 = \omega_{eP}^2/m_{\text{эф}}$.

Для частоты релаксации модели почти свободных электронов также введем обозначение ω_{e0} . Подстановка в уравнение (4) экспериментальных значений электросопротивления приводит к опосредованному учету эффективной массы электронов, т.е. из уравнения (4) можно получить соотношение $\omega_{e0} = \omega_0/m_{\text{эф}}$. В то же время при записи уравнения для времени релаксации через слабый псевдопотенциал $U(R)$ [11]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{m^* k_F}{2\pi\hbar\Omega_0} \int_0^\pi |U(q)|^2 \sin\theta d\theta \quad (9)$$

также появляется значение эффективной массы в явном виде. Здесь k_F – радиус сферы Ферми, θ – угол рассеяния электрона. Таким образом, соотношение для ω_{e0} необходимо представить в виде $\omega_{e0} = \omega_0/m_{\text{эф}}^2$. В этом случае приходим к уравнению Друде для оптической проводимости, которое следует из уравнения (2)

$$\sigma = \frac{\omega\epsilon_2}{4\pi} = \frac{m_{\text{эф}}}{4\pi} \frac{\omega_{e0}\omega_{eP}^2}{\omega^2 + m_{\text{эф}}^4\omega_{e0}^2}. \quad (10)$$

Это уравнение близко к выражению, полученному в работе [11].

Соответственно уравнение для действительной части диэлектрической проницаемости (1) можно переписать в виде

$$\epsilon_1 = 1 - \frac{1}{m_{\text{эф}} \omega^2 + m_{\text{эф}}^4 \omega_{e0}^2} \omega_{eP}^2 \quad (11)$$

Используя эффективную массу электронов 1.316 [10] и ω_0 из табл. 1, получим $\omega_{e0} = 1.744 \times 10^{15} \text{ c}^{-1}$. Значение ω_{eP} совпадает с ω_P из табл. 1. На рис. 2 для этих величин частот релаксации и плазменных колебаний приведена дисперсионная зависимость для действительной части оптической диэлектрической проницаемости, рассчитанная из уравнения (11) (кривая 2). Из рисунка видно, что для инфракрасной области спектра дисперсионные зависимости, полученные из эллипсометрического эксперимента [6] и оцененные в приближениях Друде–Зинера с учетом эффективной массы электронов, достаточно близки. Эти кривые практически совпадают для значения $m_{\text{эф}} = 1.38$.

Вернемся к анализу экспериментальных данных по оптической проводимости с помощью уравнения (6), в котором выражение для вклада от электронов проводимости $\sigma_0(\omega)$ совпадает с уравнением (10). Уравнения из работы [9], определяющие вклад в оптическую проводимость от электронов, участвующих в межзонных переходах, перепишем в виде

$$\sigma_j(\omega) = \frac{m_{\text{эф}} \omega^2 \omega_j \omega_{e0j} \omega_{ePj}^2}{4\pi (\omega^2 + m_{\text{эф}}^4 \omega_{e0j}^2)^2} \times \left(\frac{\omega^2 - m_{\text{эф}}^4 \omega_{e0j}^2}{A_j B_j} - \frac{2B_j}{A_j} + \frac{2}{\omega_j} \right), \quad (12)$$

где ω_j – положение пика межзонного перехода на кривой $\sigma(\omega)$,

$$A_j = \sqrt{\gamma_j^4 + 4\omega^2 m_{\text{эф}}^4 \omega_{e0j}^2},$$

$$B_j = \sqrt{(A_j + \gamma_j^2)/2} \quad \text{и} \quad \gamma_j^2 = \omega_j^2 - \omega^2 + m_{\text{эф}}^4 \omega_{e0j}^2.$$

В табл. 3 приведены электронные характеристики жидкого церия, полученные с использованием данных [6] по оптической проводимости и рассчитанные по описанной в работе [9] методике, включающей уравнения (10) и (12), где величина эффективной массы электронов принималась равной 1.38. Наиболее существенное отличие результатов из табл. 3 от значений, приведенных в табл. 2, состоит в более высоких величинах частоты плазменных колебаний электронов проводимости ω_{eP0} . Это предполагает плотность электронов проводимости даже более высокую, чем экспериментальное значение [6], и определяет значение z_0 , которое больше, чем валентность церия.

Из рис. 2 видно, что величина эффективной массы электронов существенно влияет на оптиче-

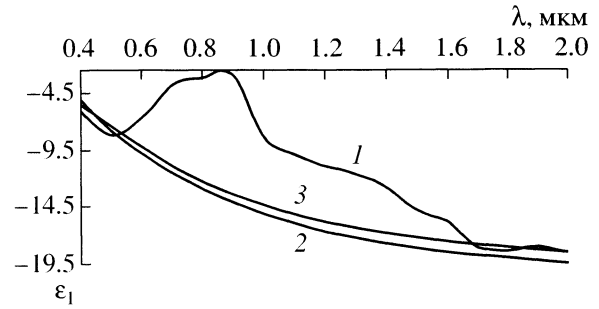


Рис. 2. Дисперсионная зависимость действительной части диэлектрической проницаемости: из данных эллипсометрического эксперимента [6] – 1, оценка в приближениях Друде–Зинера (11) с $m^* = 1.316 - 2$, $m^* = 1.38 - 3$.

ские характеристики церия в инфракрасной области спектра. Поэтому при варьировании параметра $m_{\text{эф}}$ можно получить ω_{eP0} , наиболее близкую (при точности определения $m_{\text{эф}}$ порядка 0.001) к экспериментальному значению ω_P [6] (см. табл. 1), что оказалось возможным при эффективной массе электронов в жидком церии, равной 1.374. При этом величина z_0 близка к валентности церия. Частота релаксации с учетом эффективной массы электронов, уравнение для которой можно записать в виде $\omega_0 = m_{\text{эф}}^2 \omega_{e00}$, составляет 3.12 для $m_{\text{эф}} = 1.374$ и близка к значению частоты релаксации, полученной из статической проводимости (табл. 1).

Отметим, что изменение электронных характеристик межзонных переходов с увеличением энергии фотонов сохраняет подобие в величине вкладов и порядке их следования как при учете эффективной массы электронов для ее разных значений (см. табл. 3), так и без ее учета (см. табл. 2 и 3).

Численная оценка оптических характеристик жидкого церия. В работе [9] предполагалось, что для жидких РЗМ в области энергии фотонов вблизи 2 эВ находятся вклады в оптическую проводимость от максимумов плотности электронных состояний, возникающих при брэгговском рассеянии электронов на первой координационной сфере расплава. Для случая чистого церия такой вклад находится в области вблизи 1.7 эВ. Вклады в оптическую проводимость, начинающиеся с $j = V$ (см. табл. 3 для $m_{\text{эф}} = 1.374$), приведены на рис. 3, из которого видно, что вклад с $j = V$ и $z_V = 1.37$ является основным.

В работе [12] пик поглощения фотонов в фотоэмиссионном спектре церия вблизи 1.8 эВ определяется возбуждением 4f-электронов. Однако пик от такого вклада в оптическую проводимость

Таблица 3. Электронные характеристики полосы проводимости и межзонных переходов в жидком церию с различными величинами эффективной массы электронов

j	Δ_j , эВ		$\omega_{epj} \times 10^{-15}$, с ⁻¹		$\omega_{e0j} \times 10^{-15}$, с ⁻¹		z_j	
	1.38	1.374	1.38	1.374	1.38	1.374	1.38	1.374
$m_{эф}$								
0	0	0	17.006	16.580	1.631	1.651	3.16	3.00
I	0.553	0.542	2.087	2.624	0.052	0.061	0.05	0.07
II	0.955	0.917	5.651	5.633	0.213	0.226	0.35	0.35
III	1.120	1.115	2.480	3.239	0.058	0.083	0.07	0.11
IV	1.213	1.213	1.955	1.910	0.019	0.020	0.04	0.04
V	1.703	1.699	11.161	11.210	0.288	0.285	1.36	1.37
VI	2.096	2.059	4.200	3.398	0.198	0.132	0.19	0.13
VII	2.345	2.333	2.577	3.246	0.062	0.080	0.07	0.11
VIII	2.816	2.814	5.260	5.606	0.161	0.178	0.30	0.34

должен быть очень узким, что противоречит результатам, приведенным в табл. 3 и на рис. 3.

Следует учитывать, что индуцированные светом электронные переходы происходят между множеством занятых уровней, которые образуют полосы, расположенные ниже уровня Ферми E_F и множеством свободных уровней, расположенных выше. Этот характер зависимости частотной дисперсии световой проводимости σ от плотности электронных состояний, которые ниже $N_n(E)$ и выше $N_c(E)$ уровня Ферми, представляется формулой Берглунда–Спайсера [13]

$$\sigma_{nc} = \frac{1}{\omega} \int_{E_F}^{E_F + \hbar\omega} A N_n(E - \hbar\omega) N_c(E) dE, \quad (13)$$

где A – коэффициент, содержащий матричный элемент, связывающий начальное и конечное состояния. Явно выраженные максимумы и минимумы обнаруживаются на дисперсионной зависимости $\sigma(\omega)$ в тех случаях, когда уровень Ферми расположен в области сильных аномалий плотности состояний. Из уравнения (13), имея данные о зависимости плотности электронных состояний от энергии, можно с помощью численного интегрирования рассчитать дисперсию световой про-

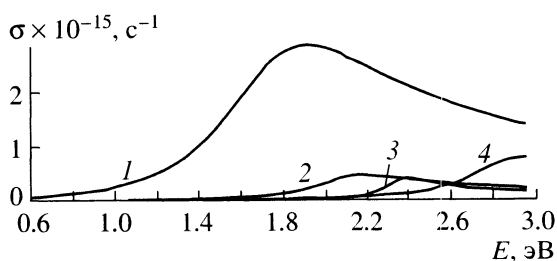


Рис. 3. Зависимость вкладов (V–VIII) в световую проводимость σ жидкого церия от энергии фотонов: вклад V – 1, вклад VI – 2, вклад VII – 3 и вклад VIII – 4.

димости. При этом коэффициент A считается постоянным, не зависящим от номера межполосного перехода и от энергии начального и конечного состояний.

Рассеяние носителей заряда в неперриодическом поле расплава может быть столь интенсивным, что их импульс не сохраняется даже приближенно. Тем самым представление о законе дисперсии как функциональной связи между энергией и импульсом ставится под сомнение. Однако предполагается [14], что термин “плотность состояний” является достаточно общим для того, чтобы его можно было использовать применительно к любой системе частиц. При этом термин “энергия” относится не к отдельным частицам, а ко всей системе взаимодействующих частиц.

Определения о разрешенных и запрещенных зонах трактуются следующим образом. Разрешенной зоной называется область значений энергии, в которой плотность состояний отлична от нуля и непрерывна. Запрещенной зоной называется область значений энергии, в которой плотность состояний либо равна нулю, либо отлична от нуля лишь в отдельных точках, где она имеет дельтообразный характер. Таким образом, при интерпретации данных оптического эксперимента в расплавах можно пользоваться уравнением (13). При этом следует принимать во внимание, что в неупорядоченных системах может возрастать роль многоэлектронных эффектов.

В работе [10] расчет плотности состояний жидких РЗМ осуществлялся во втором порядке теории возмущений псевдопотенциала. Исходным являлось уравнение для энергии электрона с волновым числом k [15]

$$E_k = E_k^0 + u(0) + \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{|u(q)|^2 S(q)}{E_k^0 - E_{k-q}^0}. \quad (14)$$

В (14) $E_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ – энергия электрона в модели свободных электронов; $u(q)$ – формфактор модельного потенциала (МП); $S(q)$ – структурный фактор. В случае локального МП (в данном случае МП Ашкрофта) в последнем члене уравнения (14) проводится аналитическое интегрирование по углам и уравнение для E_k (в атомных единицах Хартри) приобретает вид

$$E_k = \frac{k^2}{2} - \frac{2E_F}{3} - \frac{\Omega}{4\pi^2 k} \int dq q |u(q)|^2 S(q) \ln \left| \frac{q+2k}{q-2k} \right|, \quad (15)$$

в котором E_F – энергия Ферми.

Плотность состояний (на единичный интервал энергии для одного направления спина) определялась по уравнению

$$N(E) = \frac{\Omega}{2\pi^2} \left[\frac{k^2}{\partial E_k / \partial k} \right]_{E_k = E}. \quad (16)$$

При выводе (16) использовалось представление об изотропности закона дисперсии E_k для расплава.

Включение в рассмотрение эффективной массы электронов осуществляется в уравнении (15) путем деления на $m_{эф}$ первых двух вкладов и умножения последнего. На рис. 4 приведена зависимость плотности электронных состояний от волнового числа для жидкого церия как без учета ($m_{эф} = 1$), так и при учете эффективной массы электронов для значения $m_{эф} = 1.374$. Пик на кривой плотности состояний находится около $k/k_F = 0.77$. Его положение близко к значению отношения $q_m/2k_F = 0.792$, где q_m – положение первого максимума экспериментального структурного фактора, приведенного в численном виде в работе [16]. Значение q_m для расплава является аналогом величины минимального вектора для обратной решетки кристалла, для которого предполагается резкое изменение плотности состояний, связанное с брэгговским отражением.

На рис. 5 приведены зависимости плотности электронных состояний от энергии $N(E)$, для энергии, записанной в виде разности $\Delta E = E - E_F$, и двух значений эффективной массы электронов. Введение величины эффективной массы электронов, отличной от единицы, слабо влияет на положение максимума в зависимости плотности электронных состояний от волновых чисел (рис. 4). На зависимости плотности электронных состояний от энергии изменения в положении максимума весьма существенны.

Максимум плотности электронных состояний, определяемый эффектами брэгговского рассеяния электронов с $m_{эф} = 1$ на первой координационной сфере жидкого церия, расположен вблизи $\Delta E = -2.8$ эВ, что близко к величине энергии межзонного перехода под номером VIII (табл. 3 – Δ_{VIII}).

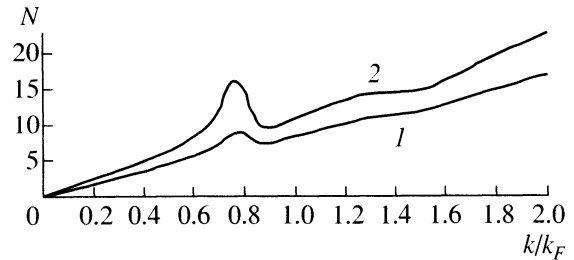


Рис. 4. Зависимость плотности состояний от волнового числа в жидком церии с $m_{эф} = 1 - 1$ и $m_{эф} = 1.374 - 2$.

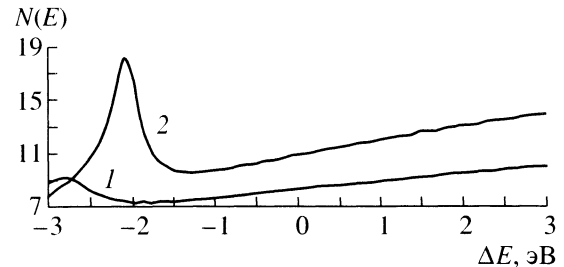


Рис. 5. Зависимость плотности состояний от энергии в жидком церии с $m_{эф} = 1 - 1$ и $m_{эф} = 1.374 - 2$.

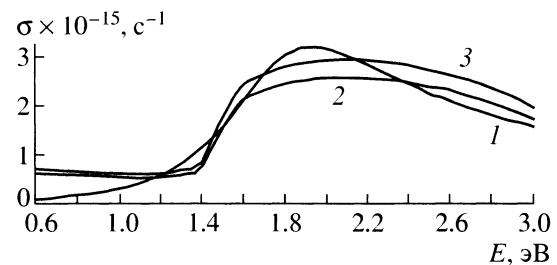


Рис. 6. Вклады в световую проводимость жидкого церия: с $j = V - 1$, с $m_{эф} = 1.90$ и параметрами $A = 0.35 - 2$, $A = 0.4 - 3$.

Соответствующий максимум для электронов с эффективной массой 1.374 находится в области $|\Delta E| \approx 2.05 - 2.10$ эВ, что близко к величине Δ_{VI} .

В дальнейшем для вклада с $j = V$ производилось варьирование величины эффективной массы электронов с последующим расчетом по уравнению (13) вклада в оптическую проводимость от этого межзонного перехода. Наилучшего согласия между дисперсионной зависимостью вклада с $j = V$ (рис. 3) и соответствующего вклада, рассчитанного по зависимости плотности электронных состояний от энергии в приближениях Берлунда–Спайсера, удалось получить при эффективной массе электронов $m_{эф}$, близкой к значению 1.9, и параметре A в районе значений 0.35–0.40. Критерием выбора эффективной массы являлась близость положения на шкале энергии фотонов резкого воз-

растания оптической проводимости вкладов, полученных из уравнения (12) с $j = V$ и из уравнения (13). Вид дисперсионной зависимости этих вкладов приведен на рис. 6.

Внешняя оболочка атома церия состоит из одного $5d$ -электрона и двух $6s$ -электронов, которые, в свою очередь, участвуют в формировании зоны проводимости церия в металлическом состоянии. Таким образом, можно предполагать, что эффективную массу $m_{эф} = 1.9$ имеют электроны в количестве 1.37 (см. z_V из табл. 3), которые рассеиваются на относительно узкой $5d$ -полосе. Если для $6s$ -электронов эффективная масса $m_{эф} = 1.0$, то средняя эффективная масса составит величину 1.4, близкую к результатам предыдущего раздела.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Учет эффективной массы электронов в классическом уравнении Друде для оптической проводимости позволяет провести оценку величины этого параметра на основе данных оптического эксперимента. Для церия в жидком состоянии значение эффективной массы электронов установлено вблизи 1.38.

2. Предполагается, что вид дисперсионной зависимости оптической проводимости жидких редкоземельных металлов (РЗМ) в области энергии фотонов вблизи 2 эВ определяется вкладом максимума плотности электронных состояний, возникающего при брэгговском рассеянии электронов на первой координационной сфере расплава. Показано, что для жидкого церия экспериментальная зависимость оптической проводимости при энергии фотонов выше 1.7 эВ может быть описана с учетом эффективной массы электронов, имеющей четыре значения, изменяющихся от единицы до 1.8. Средняя величина эффективной массы электронов близка к значению 1.4.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 02-02-17579).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Носков М.М. Магнетооптические явления в редкоземельных металлах. В сб.: Электронная структура и физические свойства редких земель и актинидов. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1981. С. 22.
2. Маделунг О. Теория твердого тела. М.: Наука, 1980. 416 с.
3. Князев Ю.В., Носков М.М. Оптические свойства редкоземельных металлов. В сб.: Электронная структура и физические свойства редких земель и актинидов. Свердловск: УНЦ АН СССР, 1981. С. 3.
4. Друде П. Оптика. М.–Л.: ОНТИ, 1935. 468 с.
5. Kononenko V.I., Sukhman A.L., Gruverman S.L., Torokin V.V. Density and Surface Tension of Liquid Rare Earth Metals, Scandium, and Yttrium // Phys. Stat. Sol. (a). 1984. V. 84. P. 423.
6. Акашев Л.А., Кононенко В.И. Оптические свойства жидкого церия // Расплавы. 1991. № 5. С. 115.
7. Гюнтеродт Г.Й., Хаузер Э., Кюнц Х.У. Электропроводность жидких редкоземельных металлов и их сплавов. В сб.: Жидкие металлы. Материалы 3-й Междунар. конф. по жидким металлам. М.: Металлургия, 1980. С. 226.
8. Мотулевич Г.П. Оптические свойства непереходных металлов // Тр. ФИАН СССР. 1971. Т. 55. С. 3.
9. Киселев А.И., Кононенко В.И., Акашев Л.А. Оптические свойства легких РЗМ в жидком состоянии // ТВТ. 2002. Т. 40. № 1. С. 50.
10. Киселев А.И., Кононенко В.И. Электронный вклад в энтропию жидких редкоземельных металлов // Металлы. 1998. № 1. С. 46.
11. Фабер Е. Электронные явления переноса в жидких металлах. В сб.: Физика металлов. Вып. 1. Электроны. М.: Мир, 1972. С. 315.
12. Baer J., Busch G. X-Ray Photoemission Study of Some Light Rare-Earth Metals // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 31. № 1. P. 35.
13. Berglund C.N., Spicer W.E. Photoemission Studies of Copper and Silver: Experiment // Phys. Rev. 1964. V. 136A. № 4. P. 1044.
14. Бонч-Бруевич В.Л., Звягин И.П., Кайпер Р. и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М.: Наука, 1981. 384 с.
15. Момм Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1974. 472 с.
16. Waseda Y. The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquids and Amorphous Solids. New York: Me Graw-Hill, 1980. 326 p.