

Ширина линии поверхностных состояний простых металлов

© В.М. Силкин, Е.В. Чулков

Departamento de Fisica de Materiales, Facultad de Quimica, Universidad del Pais Vasco/Fuskal Herrico Unibertsitatea, Apdo. 1072 20018 San Sebastian/Donostia, Basque Country, Spain

Donostia International Physics Center and Centro mixto CSIC-UPV/EHU,

Donostia, Basque Country, Spain

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук,

634021 Томск, Россия

E-mail: waxslavs@sqox01.sq.ehu.es

(Поступила в окончательном виде 11 января 2000 г.)

Представлены результаты расчета ширины линии (обратного времени жизни) Γ_{e-e} поверхностных состояний для Be(0001) и Mg(0001). Ширина линии состояния вычисляется как проекция мнимой части собственной энергии квазичастицы на само состояние. Экранированное кулоновское взаимодействие рассчитывается с помощью модельного потенциала, учитывающего энергетическую щель в проекционной зонной структуре и поверхностное состояние, расположенное в этой щели. Волновые функции и энергии электронных состояний вычисляются в рамках самосогласованного пленочного псевдопотенциального метода. На основе проведенных расчетов показано, что Γ_{e-e} существенно зависит от положения поверхностного состояния в зоне Бриллюэна. Также показано, что переходы из зон поверхностных состояний в основном определяют отличие вычисленных значений Γ_{e-e} от получаемых в модели однородного электронного газа.

Мы выражаем благодарность отделу образования правительства страны басков, которое частично финансировало проведение работ по этому проекту, а также Э.Зарате за помощь в проведении части расчетов.

Фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением широко применяется при исследовании различных свойств твердых тел [1]. В частности, из анализа энергетического положения максимумов в спектрах, получаемых с помощью этого метода, можно непосредственно определять трехмерную зонную структуру объемных материалов, а также дисперсию зон поверхностных состояний. Однако фотоэмиссионные спектры дополнительно содержат большой объем информации о многочастичных эффектах в электронной системе. Например, измеряемая ширина линий Γ_{exp} поверхностных состояний определяется вкладами от неупругого электрон-электронного рассеяния, электрон-фононного взаимодействия и рассеяния электронов на дефектах кристаллической структуры и примесях [1–8]. На получаемые результаты также влияет разрешение приборов [8]. В результате измеряемые ширины линий сложным образом зависят от многих факторов и условий проведения эксперимента. Понимание поведения каждого фактора и его влияния на получаемые спектры представляет значительный фундаментальный интерес. В последние несколько лет появились экспериментальные работы, в которых были проведены исследования влияния поверхностных дефектов и температуры образцов на измеряемые ширины линий [5–7]. В измерениях ширины линии поверхностного состояния для меди [5–7] удалось определить электрон-фононный вклад и вклад от рассеяния электронов на дефектах. В результате экспериментально была найдена ширина линии Γ_{e-e} поверхностного состояния, определяемая только неупругим электрон-электронным взаимодействием. Сравнение экспериментальных значений с тем, которое получается для модели однородного электронного газа (ОЭГ) в рамках теории Ферми-жидкости Ландау [9] показало, что несмотря на высокую точность

проведенных экспериментов, измеренные величины Γ_{e-e} поверхностных состояний для Cu(111) превосходят теоретическое значение в 4–6 раз [5–7]. Аналогичные расхождения наблюдаются для поверхностей других благородных металлов [10,11]. Для простых металлов также существуют большие различия между экспериментальными данными и результатами теоретических расчетов. Например, измеренные значения ширины линии поверхностного состояния в центре зоны Бриллюэна на поверхности Be(0001) при комнатной температуре составляют 350–440 meV [12–14]. Из анализа зависимости ширины линии Γ_{exp} от температуры, приведенной в работе [13] (в предположении, что вклад дефектов аналогичен таковому для случая поверхности Cu(111) [6]), можно оценить величину Γ_{e-e} поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ для поверхности Be(0001) — порядка 300 meV. Как и для меди, это значение существенно выше, чем значение $\Gamma_{e-e} = 92$ meV, получаемое в рамках модели ОЭГ [9] для параметра $r_s = 1.87$, соответствующего объемному бериллию. Для поверхности (0001) другого простого металла, Mg, фотоэмиссионные измерения ширины линии поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ дали сильно различающиеся между собой величины ~ 200 [15] и ~ 500 meV [16]. Оба эти значения также существенно превышают $\Gamma_{e-e} = 60$ meV, получаемой в модели ОЭГ.

В связи с этим возникает вопрос, является ли систематическое расхождение свидетельством все еще недостаточной точности измерений или оно связано с недостатками теории. Возможно, существует дополнительный механизм затухания, подобный, например, введенному в работе [7]. В [7] дополнительное уширение линии поверхностного состояния приписывается рассеянию на особом роде дефектах, не наблюдаемых в экспериментах по дифракции медленных электронов. Как извест-

но, результаты работы [9] были получены для модели однородного электронного газа, которая не учитывает зонную структуру металла и наличие поверхности. При этом вблизи уровня Ферми E_F ширина линии Γ_{e-e} квазичастицы, связанная с неупругим электрон-электронным взаимодействием, пропорциональна квадрату энергии E квазичастицы относительно E_F

$$\Gamma_{e-e} = \Gamma_0(E - E_F)^2, \quad (1)$$

где параметр Γ_0 определяется только плотностью электронного газа соответствующего металла [3] (ширина линии Γ_{e-e} связана с временем жизни τ квазичастицы соотношением Гейзенберга $\Gamma_{e-e} \cdot \tau = 1 \text{ a.u.} = 660 \text{ meV} \cdot \text{fs}$).

В настоящей работе приводятся результаты расчета собственной ширины линии Γ_{e-e} поверхностных состояний, когда в рассмотрение принимается трехмерная атомная структура кристаллической решетки. Используемый подход является обобщением метода, который был использован для расчета ширины линии состояний потенциала изображения [17]. Хорошо известно, что состояния потенциала изображения локализируются в основном за пределами кристалла [18,19]. Поэтому квазидродное приближение к расчету ширины линии этих состояний является хорошо оправданным. По сравнению с состояниями изображения поверхностные состояния в гораздо большей степени перекрываются с объемными электронными состояниями, и поэтому шероховатость поверхности может сильнее влиять на ширину линии поверхностных состояний. В рамках настоящего подхода начальные и конечные состояния квазичастиц рассчитываются в рамках самосогласованного пленочного псевдопотенциального метода, а экранированное кулоновское взаимодействие вычисляется аналогично работе [17]. Этот подход применяется для расчета собственной ширины линии Γ_{e-e} поверхностных состояний для поверхностей $\text{Be}(0001)$ и $\text{Mg}(0001)$. Как известно, электронная структура Mg хорошо описывается в приближении почти свободных электронов. Магний имеет достаточно слабый псевдопотенциал и его зонная структура имеет узкие щели [20]. Поверхностные состояния на поверхности $\text{Mg}(0001)$ слабо локализованы в окрестности поверхностного атомного слоя и глубоко проникают в металл [21,22]. С другой стороны, зонная структура Be существенно отличается от энергетической структуры свободных электронов. Например, плотность состояний объемного бериллия на уровне Ферми близка к нулю, и в этом отношении Be похож, скорее, на полупроводник, чем на металл [23]. Такое отличие бериллия от типичных непериодических металлов определяется его сильным ионным псевдопотенциалом. Поверхностная электронная структура бериллия характеризуется широкими запрещенными щелями в окрестности уровня Ферми, в которых локализируются хорошо выраженные поверхностные состояния [12,22–25]. Таким образом, на примере этих двух s - p -металлов можно исследовать два крайних случая влияния зонной структуры и поверхностных эффектов на время жизни поверхностных состояний.

1. Метод расчета

Собственная ширина линии Γ_{e-e} , равная обратной величине времени жизни τ , квазичастицы (в нашем случае это дырки) в состоянии, характеризуемом волновым вектором \bar{q} , энергией $E_{0\bar{q}}$ и волновой функцией $\Psi_{0\bar{q}}(\mathbf{r})$ (в настоящей работе используются стандартные обозначения, когда двумерные вектора обозначаются вверху чертой, $\mathbf{G} = \{\bar{\mathbf{G}}, G_z\}$), определяется как проекция мнимой части собственной энергии Σ квазичастицы на само состояние

$$\Gamma_{e-e} = \tau^{-1} = -2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \Psi_{0\bar{q}}^*(\mathbf{r}) \text{Im} \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_{0\bar{q}}) \Psi_{0\bar{q}}(\mathbf{r}'). \quad (2)$$

Здесь и далее в формулах используется атомная система единиц, т.е. $e^2 = \hbar = m_e = 1$. Для расчета оператора собственной энергии Σ используем так называемое GW приближение, когда учитывается только первый член в разложении Σ по экранированному кулоновскому потенциалу W [26]. Используя для функции Грина G приближение нулевого порядка (функция Грина для системы "невоздействующих" частиц), легко получить выражение для $\text{Im} \Sigma$

$$\text{Im} \Sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_{0\bar{q}}) = \sum_{E_{0\bar{q}} < E_{n\bar{k}} < E_F} \Psi_{n\bar{k}}^*(\mathbf{r}') \times \text{Im} W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E_{n\bar{k}} - E_{0\bar{q}}) \Psi_{n\bar{k}}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

где суммирование проводится по всем состояниям с волновой функцией $\Psi_{n\bar{k}}(\mathbf{r})$ и энергией $E_{n\bar{k}}$ в интервале между энергией состояния $E_{0\bar{q}}$ и уровнем Ферми E_F . Экранированный кулоновский потенциал $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ определяется выражением

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \int d\mathbf{r}'' \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) V(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'). \quad (4)$$

В выражении (4) $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E)$ — обратная диэлектрическая функция и $V(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}')$ — кулоновский потенциал. В рамках приближения хаотических фаз (ПХФ) ε^{-1} и функция отклика χ связаны соотношением, которое символически выглядит следующим образом:

$$\varepsilon^{-1} = 1 + V\chi. \quad (5)$$

Таким образом, для расчета ширины линии Γ_{e-e} по формуле (2) необходимо знать волновые функции и энергии состояний и диэлектрическую функцию ε . Вычисления требуемых величин мы проводим в модели тонких пленок, периодически повторяющихся в направлении, перпендикулярном плоскости рассматриваемой поверхности, и разделенных вакуумными промежутками. Число используемых в расчетах атомных слоев для $\text{Be}(0001)$ и $\text{Mg}(0001)$ составляет соответственно 20 и 26. Центр координат выбран в середине пленки и ось координат z направлена перпендикулярно поверхности.

Для расчета волновых функций и энергий начальных и конечных состояний применяется самосогласованный псевдопотенциальный метод. Для описания обменно-корреляционного потенциала используется приближение локальной плотности [27,28]. Нелокальные, сохраняющие норму псевдопотенциалы бериллия и магния строились согласно [29,30]. В разложении волновых функций

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} c_{n\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \exp(i(\bar{\mathbf{k}}\mathbf{r} + \mathbf{G}\mathbf{r})) \quad (6)$$

были учтены все плоские волны до энергии обрезания 15 Ry для Be и 5 Ry для Mg. В [6] Ω — объем кристалла и \mathbf{G} — вектора обратной решетки.

Расчет экранированного кулоновского потенциала W для поверхности из первых принципов с учетом трехмерной атомной кристаллической структуры представляет очень трудоемкую в вычислительном плане задачу. Поэтому для вычисления W использован подход, предложенный в работе [17], когда расчеты проводятся с помощью одномерного модельного потенциала [31,32]. Этот потенциал воспроизводит энергетическую щель в точке $\bar{\Gamma}$ поверхностной зоны Бриллюэна, а также энергии связи поверхностного состояния и первого состояния изображения. Использование такого модельного потенциала позволяет реалистично воспроизвести поведение экранированного кулоновского потенциала W вдоль направления z . Пренебрежение в расчете W зависимостью потенциала от координат x и y не должно существенно влиять на вычисляемые ширины линий поскольку, как было показано в [17], Γ_{e-e} не очень чувствительна к форме приближений, используемых для W . Тогда для W можно записать следующее разложение в ряд Фурье:

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{L^2} \sum_{\bar{\mathbf{q}}} W(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) \exp(i\bar{\mathbf{q}}(\bar{\mathbf{r}} - \bar{\mathbf{r}}')). \quad (7)$$

Здесь L — нормировочная длина, $\bar{\mathbf{q}}$ — волновой вектор из двумерного обратного пространства. Выполняя аналогичное преобразование Фурье для V и χ , получаем следующее выражение для $W(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E)$:

$$\text{Im } W(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) = \int dz_1 \int dz_2 V(z, z_1; \bar{\mathbf{q}}) \times \text{Im } \chi(z_1, z_2; \bar{\mathbf{q}}; E) V(z_2, z'; \bar{\mathbf{q}}). \quad (8)$$

В выражении (8) $V(z, z'; \bar{\mathbf{q}})$ и $\chi(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E)$ — двумерные преобразования Фурье соответственно кулоновского потенциала и функции отклика. В рамках ПХФ $\chi(z, z'; \bar{\mathbf{q}})$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\chi(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) = \chi^0(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) + \int dz_1 \times \int dz_2 \chi^0(z, z_1; \bar{\mathbf{q}}; E) V(z_1, z_2; \bar{\mathbf{q}}) \chi(z_2, z'; \bar{\mathbf{q}}; E), \quad (9)$$

где $\chi^0(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E)$ — функция отклика для "независимых" частиц. Выражение для расчета $\chi^0(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E)$

имеет вид [33]

$$\chi^0(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) = \sum_{l=1}^{E_F} \sum_{l'=1}^{\infty} F_{ll'}(\bar{\mathbf{q}}; E) \varphi_l(z) \varphi_{l'}(z) \varphi_l(z') \varphi_{l'}(z'), \quad (10)$$

где

$$F_{ll'}(\bar{\mathbf{q}}; E) = -\frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{Q}} f_{\bar{\mathbf{Q}}, l} \left\{ \frac{1}{\bar{\mathbf{q}}\bar{\mathbf{Q}} + \bar{\mathbf{q}}^2/2 - \varepsilon_l + \varepsilon_{l'} + E + i\eta} + \frac{1}{\bar{\mathbf{q}}\bar{\mathbf{Q}} + \bar{\mathbf{q}}^2/2 - \varepsilon_l + \varepsilon_{l'} - E - i\eta} \right\}$$

и

$$f_{\bar{\mathbf{Q}}, l} = 2\theta \left(E_F - \varepsilon_l - \frac{\bar{\mathbf{Q}}^2}{2} \right).$$

Здесь η — бесконечно малый параметр, θ — функция Хэвисайда, $\bar{\mathbf{Q}}$ — вектор обратной двумерной решетки. В выражении (10) волновые функции $\varphi_l(z)$ и энергии ε_l рассчитываются путем решения уравнения Шредингера с одномерным модельным потенциалом [31,32], построенным для используемых в расчете пленок. Для вычисления W применяется двойное преобразование Фурье

$$W(z, z'; \bar{\mathbf{q}}; E) = \sum_{g, g'} W_{gg'}^c(\bar{\mathbf{q}}; E) \cos(gz) \cos(g'z') + \sum_{g, g' \neq 0} W_{gg'}^s(\bar{\mathbf{q}}; E) \sin(gz) \sin(g'z'). \quad (11)$$

Здесь $-T/2 < z, z' < T/2$ и $g = 2\pi n/T$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$ для разложений по \cos и $n = 1, 2, 3, \dots$ для разложений по \sin), T — длина элементарной ячейки вдоль оси z .

С учетом всех приближений и разложений, сделанных выше, при переходе в (3) от суммирования к интегрированию с последующим суммированием по спектрочкам выражение (2) для Γ_{e-e} приобретает следующий вид:

$$\Gamma_{e-e} = \frac{1}{2S} \frac{1}{N_{\mathbf{R}}} \sum_{\bar{\mathbf{k}}} \sum_{E_{0\bar{\mathbf{q}}} \leq E_{n\bar{\mathbf{k}}} \leq E_F} w_n(\bar{\mathbf{k}}) \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\bar{\mathbf{G}}_A} \times \left\{ \sum_{g, g'} W_{gg'}^c(\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{G}}_A; E_{0\bar{\mathbf{q}}} - E_{n\bar{\mathbf{k}}}) \times B_{n0}^+(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}}; \bar{\mathbf{G}}_A, g) B_{n0}^+(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}}; \bar{\mathbf{G}}_A, g') + \sum_{g, g' \neq 0} W_{gg'}^s(\bar{\mathbf{q}} - \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}} + \bar{\mathbf{G}}_A; E_{0\bar{\mathbf{q}}} - E_{n\bar{\mathbf{k}}}) \times B_{n0}^-(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}}; \bar{\mathbf{G}}_A, g) B_{n0}^-(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}}; \bar{\mathbf{G}}_A, g') \right\}, \quad (12)$$

где использованы обозначения

$$B_{n0}^{\pm}(\bar{\mathbf{q}}, \mathbf{R}\bar{\mathbf{k}}; \bar{\mathbf{G}}_A, g) = \sum_{\mathbf{G}} c_{n\bar{\mathbf{k}}}(\mathbf{G}) \left[c_{0\bar{\mathbf{q}}}(\mathbf{R}\bar{\mathbf{G}} + \bar{\mathbf{G}}_A, G_z + g) \pm c_{0\bar{\mathbf{q}}}(\mathbf{R}\bar{\mathbf{G}} + \bar{\mathbf{G}}_A, G_z - g) \right]. \quad (13)$$

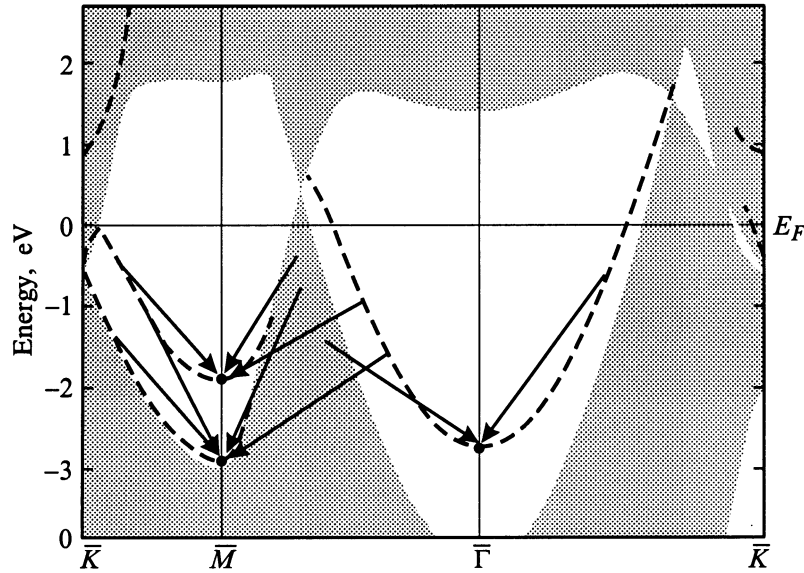


Рис. 1. Электронная структура поверхности Be(0001). Серым цветом показана проекция объемных состояний. Поверхностные и резонансные состояния изображены штриховыми линиями. Стрелками символически показаны возможные переходы, вносящие существенные вклады в затухание поверхностных состояний в точках $\bar{\Gamma}$ и \bar{M} .

В (12) суммирование по спецточкам $\bar{\mathbf{k}}$ выполняется только в неприводимой части поверхностной зоны Бриллюэна для набора точек 18×18 [34], S — площадь поверхностной элементарной ячейки, $N_{\mathbf{R}}$ — число операций симметрии точечной группы \mathbf{R} , $w_n(\bar{\mathbf{k}})$ — веса спецточек, нормированные на $N/2$, где N — число электронов в элементарной ячейке. Поскольку для рассмотренного энергетического интервала матричные элементы $W_{gg'}^c(\bar{\mathbf{k}}, E)$ и $W_{gg'}^s(\bar{\mathbf{k}}, E)$ быстро уменьшаются при увеличении модуля волнового вектора $\bar{\mathbf{k}}$, то в (12) в суммировании по векторам двумерной обратной решетки $\bar{\mathbf{G}}_A$ достаточно учесть только несколько наименьших по модулю векторов. В суммировании по g учитываются члены до $g_{\max}^2 = 5 \text{ Ry}$ для Mg и $g_{\max}^2 = 7 \text{ Ry}$ для Be, что соответствует размеру матриц W^c и W^s порядка 70. При этом получаемые результаты не изменяются при увеличении размера матриц. Поскольку в (13) основные вклады определяются коэффициентами разложения $c_{n\bar{\mathbf{k}}}(\mathbf{G})$ для наименьших по модулю векторов \mathbf{G} , то для уменьшения времени расчета нет необходимости проводить суммирование по всем векторам \mathbf{G} , для которых рассчитывался энергетический спектр. Проведенные тесты показывают, что для получения хорошо сходящихся результатов достаточно учесть в выражении (13) в суммировании ~ 500 векторов \mathbf{G} .

2. Результаты расчета и обсуждение

На рис. 1 показана рассчитанная методом псевдопотенциала электронная структура поверхности Be(0001). Как следует из рисунка, она характеризуется широкими запрещенными щелями в окрестности уровня Ферми,

в которых локализуются поверхностные состояния. Поверхностное состояние в точке $\bar{\Gamma}$ и верхнее поверхностное состояние в точке \bar{M} обладают высокой степенью локализации волновой функции в окрестности поверхностного слоя и слабо проникают внутрь кристалла [22]. Нижнее поверхностное состояние в точке \bar{M} обладает гораздо менее выраженным поверхностным характером. Максимум его зарядовой плотности локализуется в районе третьего поверхностного атомного слоя [22]. На рисунке стрелками символически изображены возможные электронные переходы для поверхностных состояний в точках $\bar{\Gamma}$ и \bar{M} . Так, для состояния в точке $\bar{\Gamma}$ основные вклады в ширину линии определяются электронными переходами из объемных состояний и внутризонными переходами из самого поверхностного состояния. Вклады в ширину линии этого состояния от переходов из поверхностных состояний, расположенных в окрестности точки \bar{M} , не превышают 2% от рассчитанной полной ширины линии и при дальнейшем анализе не рассматриваются. Также пренебрежимо малым является вклад в ширину линии верхнего поверхностного состояния в точке \bar{M} от зоны нижнего поверхностного состояния. Вычисленная в рамках подхода, описанного в предыдущем разделе, ширина уровня поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ для Be(0001) получилась равной 315 meV. Для верхнего и нижнего поверхностных состояний в точке \bar{M} рассчитанные величины Γ_{e-e} равны соответственно 95 и 110 meV. Для того чтобы исследовать зависимость ширины уровней от энергии связи состояний мы провели аналогичные расчеты Γ_{e-e} соответствующих поверхностных состояний для ряда точек $\bar{\mathbf{k}}$ вдоль симметричных направлений $\bar{\Gamma}\bar{K}$, $\bar{\Gamma}\bar{M}$ и $\bar{M}\bar{K}$. Как следует из рис. 1, поверхностное

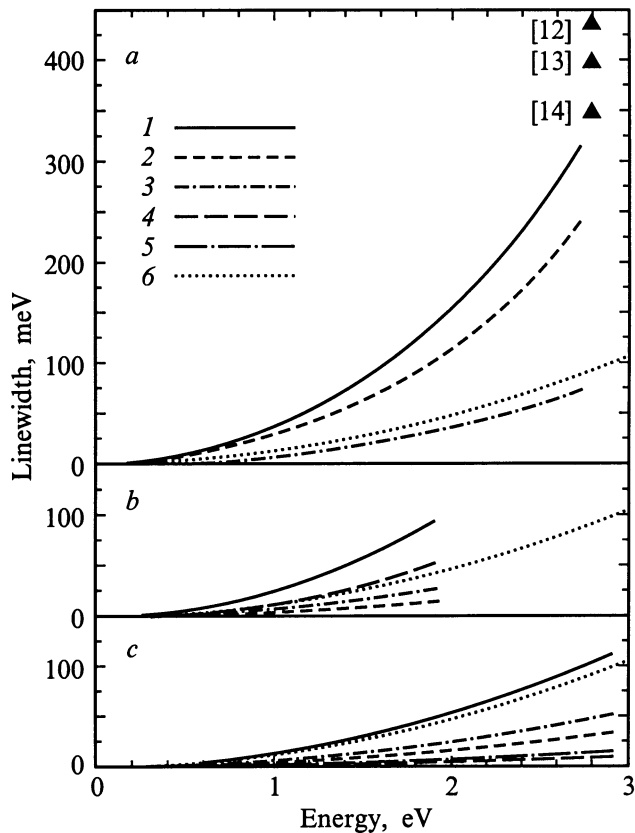


Рис. 2. Поверхность Be(0001). 1 — зависимость ширины линии Γ_{e-e} от энергии связи для поверхностного состояния, расположенного в окрестности точки $\bar{\Gamma}$ (a); для верхнего (b) и нижнего (c) поверхностных состояний, локализованных в окрестности точки \bar{M} . 2 и 3 — вклады в Γ_{e-e} , связанные с переходами из зоны поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ и межзонными переходами из объемных состояний. 4 — вклады в Γ_{e-e} , связанные с переходами из зоны верхнего поверхностного состояния в точке \bar{M} . 5 — вклад в Γ_{e-e} , связанный с внутризонными переходами из зоны нижнего поверхностного состояния в точке \bar{M} . 6 — Γ_{e-e} для модели ОЭГ [9]. Треугольники — экспериментальные значения ширины линии поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ [12-14].

состояние, расположенное в окрестности точки $\bar{\Gamma}$, а также верхнее состояние около точки \bar{M} распространяются до уровня Ферми и выше. Поэтому оказывается возможным рассчитать ширину линии этих состояний при приближении к уровню Ферми. Как было показано в [22], при распространении вдоль запрещенных щелей зарядовая плотность всех трех поверхностных состояний относительно слабо изменяет свою пространственную локализацию. В этом случае изменения вычисляемых значений Γ_{e-e} , вызванные изменением энергий состояний, будут определяться в основном доступным для затухания фазовым пространством. На рис. 2 приведены кривые зависимости ширины уровней от энергии для этих трех поверхностных состояний, рассчитанных для разных векторов \bar{k} (и соответственно для разных

значений энергий связи). Также на рисунке приведены экспериментальные значения ширины линии поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$. Видно, что вычисленное авторами значение ширины уровня для этой точки хорошо согласуется с экспериментальными значениями. Как уже было отмечено выше, вычитание из экспериментально измеренных значений Γ_{exp} вкладов, связанных с электрон-фононным взаимодействием и поверхностными дефектами, должно привести к некоторому понижению экспериментальных значений, улучшая к лучшему согласию с расчетом. Из рисунка следует, что существует большое различие в величине Γ_{e-e} разных состояний для одних и тех же значений энергии. Для энергий связи больших ~ 0.6 eV значения Γ_{e-e} для разных состояний отличаются в 2–3 раза. Также на рисунке для сравнения приведены кривые зависимости $\Gamma_{e-e}(E)$, рассчитанные в модели ОЭГ [9] для параметра r_s , соответствующего Be. Видно, что для двух поверхностных состояний рассчитанные значения Γ_{e-e} для соответствующих энергий в 2–3 раза превосходят эту величину. В то же время ширина линии для нижнего состояния в точке \bar{M} близка к рассчитанной в модели ОЭГ.

Для того чтобы вскрыть природу такого различия, на рис. 2, a авторы привели кривые зависимости вклада объемных состояний в ширину линии поверхностного состояния в окрестности точки $\bar{\Gamma}$, а также уширение линии, связанное с внутризонными переходами из этого же поверхностного состояния. Как видно из рисунка, для этого состояния определяющую роль играет вклад, вызванный внутризонными переходами из самого поверхностного состояния. До 75% уширения линии вызывается этими переходами. В то же время вклад от объемных состояний близок к тому, что получается в модели ОЭГ [9]. Аппроксимация полученной кривой $\Gamma_{e-e}(E)$ функцией вида

$$\Gamma_{e-e} = \beta(E - E_F)^\alpha \quad (14)$$

свидетельствует, что показатель $\alpha \approx 1.95$, т.е. близок к 2, как в модели ОЭГ.

На рис. 2, b и c приведены аналогичные кривые зависимости ширины линий от энергии соответственно для верхнего и нижнего поверхностных состояний, расположенных в окрестности точки \bar{M} . В отличие от состояния в окрестности точки $\bar{\Gamma}$ для этих поверхностных состояний существует несколько сравнимых по величине вкладов. Так, для верхнего состояния существенными являются три вклада: объемный, из состояния в окрестности точки $\bar{\Gamma}$, а также внутризонный из самого поверхностного состояния. Для нижнего состояния добавляется вклад, вызванный переходами из верхнего поверхностного состояния в окрестности точки \bar{M} . Как и для поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$, энергетическая зависимость ширины линий $\Gamma_{e-e}(E)$ этих состояний хорошо описывается функцией (14) с параметром α , близким к 2. В отличие от состояния в точке $\bar{\Gamma}$ для этих поверхностных состояний вклады, вызванные переходами из объемных состояний,

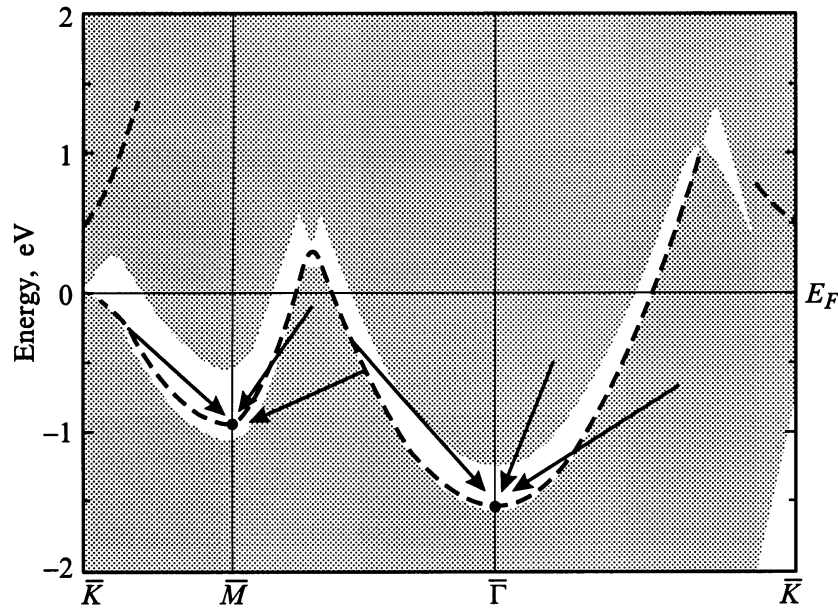


Рис. 3. То же, что на рис. 1, для поверхности Mg(0001).

заметно ниже тех, что получаются в модели ОЭГ [9]. При этом для нижнего состояния этот вклад является доминирующим, поскольку это состояние имеет гораздо менее выраженный поверхностный характер [22].

Другая зависимость ширины линии поверхностных состояний от разных точек зоны Бриллюэна наблюдается на поверхности Mg(0001). На рис. 3 показана электронная структура для этой поверхности вблизи уровня Ферми [22]. Как видно из рисунка, в узких запрещенных щелях в окрестности точек $\bar{\Gamma}$ и \bar{M} локализуется по одному поверхностному состоянию. На рис. 4 приведены кривые зависимости Γ_{e-e} от энергии для этих поверхностных состояний. Как следует из рисунка, на этой поверхности величины Γ_{e-e} поверхностных состояний слабо отличаются между собой в совпадающем энергетическом интервале и по сравнению с бериллием в гораздо меньшей степени отличаются от значений, получаемых в модели ОЭГ [9]. На этом же рисунке приведены кривые зависимости различных вкладов в ширину линий от энергии. Видно, что в отличие от ситуации с Ве ширина линий для этих состояний в основном определяется объемными вкладами. При этом для обоих состояний вклады, вызванные переходами из поверхностных состояний, практически совпадают. Как и для Ве(0001), объемный вклад в Γ_{e-e} поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ является близким к тому, что получается в модели ОЭГ для параметра $r_s = 2.65$, соответствующего магнию. Извлеченные из фотоэмиссионных кривых значения $\Gamma_{\text{exp}} \sim 200$ [15] и ~ 500 meV [16] для поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ существенно превосходит $\Gamma_{e-e} = 92$ meV, рассчитанную авторами, и $\Gamma_{e-e} = 60$ meV для модели ОЭГ. Основываясь на результатах для поверхности Ве(0001), а также учитывая

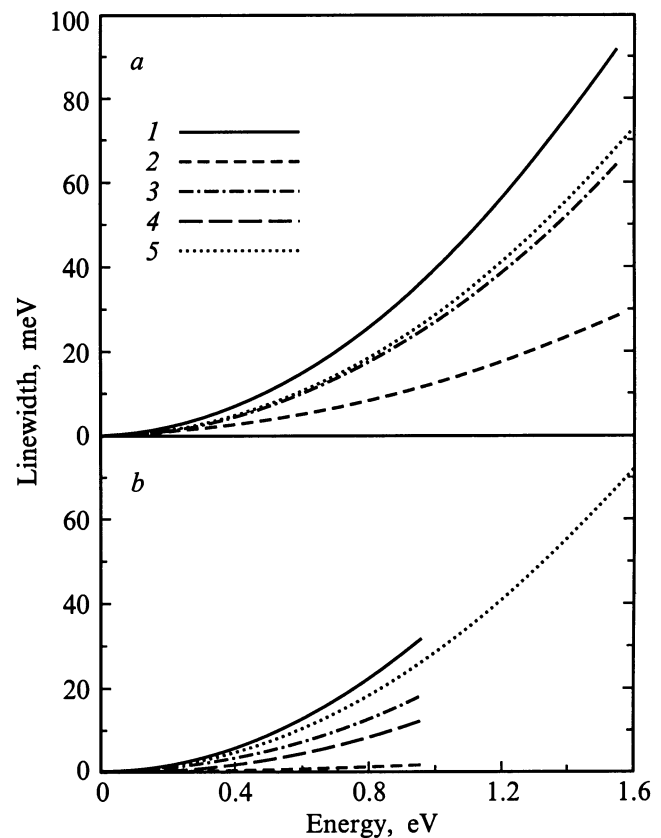


Рис. 4. Поверхность Mg(0001). 1 — зависимость ширины линии Γ_{e-e} от энергии связи для поверхностных состояний, расположенных в окрестности точки $\bar{\Gamma}$ (a) и точки \bar{M} (b). 2 и 3 — вклады в Γ_{e-e} , связанные с переходами из зоны поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ и межзонными переходами из объемных состояний. 4 — вклады в Γ_{e-e} , связанные с внутризонными переходами из зоны поверхностного состояния в точке \bar{M} . 5 — Γ_{e-e} для модели ОЭГ [9].

большое различие между самими экспериментальными величинами, считаем, что это расхождение прежде всего связано с условиями проведения экспериментов, и что на экспериментальные значения Γ_{exp} в значительной степени повлияло уширение линии, связанное с электрон-фононным взаимодействием и наличием поверхностных дефектов. Поэтому было бы желательно провести новые фотоэмиссионные измерения для этой поверхности на основе современного уровня подготовки образцов.

Таким образом, на основе проведенных расчетов для поверхностей $\text{Be}(0001)$ и $\text{Mg}(0001)$ показана важная роль переходов из зон поверхностных состояний в формировании ширины линий этих состояний. Для обеих поверхностей эти переходы в основном определяют различие вычисленных в настоящей работе ширин линий от получаемых в модели ОЭГ [9]. Для поверхностных состояний, расположенных в широких запрещенных щелях, вклад от зон поверхностных состояний увеличивает вычисляемые значения Γ_{e-e} в 2–3 раза. В случае $\text{Be}(0001)$ учет этого вклада для поверхностного состояния в точке $\bar{\Gamma}$ дает величину Γ_{e-e} , хорошо согласующуюся с последними экспериментальными результатами [5–7], и, таким образом, объясняет существовавшее ранее расхождение между теорией и экспериментом. На поверхности $\text{Mg}(0001)$, где эффекты зонной структуры гораздо слабее, рассчитанные значения ширины линий поверхностных состояний в гораздо меньшей степени отличаются от полученных в модели ОЭГ. Для обеих рассмотренных поверхностей ширины линий поверхностных состояний являются квадратичными функциями энергии. При этом коэффициенты пропорциональности отличаются от получаемых в модели ОЭГ и зависят от рассматриваемой поверхности и типа поверхностного состояния.

Список литературы

- [1] S.D. Kevan. Phys. Rev. Lett. **50**, 526 (1983).
- [2] J. Tersoff, S.D. Kevan. Phys. Rev. **B28**, 4267 (1983).
- [3] N.V. Smith. Comments Condens. Matter Phys. **15**, 263 (1992).
- [4] Angle-Resolved Photoemission. Theory and Current Applications / Ed. by S.D. Kevan. Elsevier, Amsterdam (1992).
- [5] B.A. McDougall, T. Balasubramanian, E. Jensen. Phys. Rev. **B51**, 13 819 (1995).
- [6] F. Theilmann, R. Matzdorf, G. Meister, A. Goldmann. Phys. Rev. **B56**, 3632 (1997).
- [7] A. Goldmann, R. Matzdorf, F. Theilmann. Surface Sci. **414**, L932 (1998).
- [8] R. Matzdorf. Surface Sci. Rep. **30**, 153 (1998).
- [9] J.J. Quinn. Phys. Rev. **126**, 1453 (1962).
- [10] S. LaShell, B.A. McDougall, E. Jensen. Phys. Rev. Lett. **77**, 3419 (1996).
- [11] J. Li, W.-D. Schneider, R. Berndt, O.R. Bryant, S. Crampin. Phys. Rev. Lett. **81**, 4464 (1998).
- [12] R.A. Bartynski, E. Jensen, T. Gustafsson, E.W. Plummer. Phys. Rev. **B32**, 1921 (1985).
- [13] T. Balasubramanian, E. Jensen, X.L. Wu, S.L. Hulbert. Phys. Rev. **B57**, R6866 (1998).
- [14] R. Matzdorf, A. Gerlach, F. Theilmann, G. Meister, A. Goldmann. Appl. Phys. **B68**, 393 (1999).
- [15] U.O. Karlsson, G.V. Hansson, P.E.S. Persson, S.A. Flödstrom. Phys. Rev. **B26**, 1852 (1982).
- [16] R.A. Bartynski, R.H. Gaylord, T. Gustafsson, E.W. Plummer. Phys. Rev. **B33**, 3644 (1986).
- [17] E.V. Chulkov, I. Sarria, V.M. Silkin, J.M. Pitarke, P.M. Echenique. Phys. Rev. Lett. **80**, 4947 (1998).
- [18] P.M. Echenique, J.B. Pendry. J. Phys. **C11**, 2065 (1978).
- [19] P.M. Echenique, J.B. Pendry. Progr. Surf. Sci. **32**, 111 (1990).
- [20] D.A. Papaconstantopoulos. Handbook of the band structure of elemental solids. Plenum Press, N.Y. (1986).
- [21] E.V. Chulkov, V.M. Silkin. Solid State Commun. **58**, 273 (1986).
- [22] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, E.N. Shirykalov. Surface Sci. **188**, 287 (1987).
- [23] E.W. Plummer, J.B. Hannon. Progr. Surf. Sci. **46**, 149 (1994).
- [24] В.М. Силкин, Е.В. Чулков. ФТТ **37**, 2795 (1995).
- [25] Ph. Hofmann, R. Stumpf, V.M. Silkin, E.V. Chulkov, E.W. Plummer. Surface Sci. **355**, L278 (1996).
- [26] L. Hedin, S. Lundqvist. Sol. State Phys. **23**, 1 (1969).
- [27] W. Kohn, L.J. Sham. Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [28] L. Hedin, B.I. Lundqvist. J. Phys. **C4**, 2064 (1971).
- [29] В.М. Силкин, Е.В. Чулков, И.Ю. Складнева, В.Е. Панин. Изв. вузов. Физика. **9**, 56 (1984).
- [30] Е.В. Чулков, В.М. Силкин, Е.Н. Ширькалов. ФММ **64**, 213 (1987).
- [31] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Surface Sci. **391**, L1217 (1997).
- [32] E.V. Chulkov, V.M. Silkin, P.M. Echenique. Surface Sci. **437**, 330 (1999).
- [33] A.G. Eguluz. Phys. Rev. Lett. **51**, 1907 (1983).
- [34] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. **B13**, 5188 (1976).