

# О РЕЗОНАНСНОМ И НЕРЕЗОНАНСНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОНОВ С ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИМИ КЛАСТЕРАМИ

**А. В. Гордеев**\*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

**И. А. Гордеев**

*Московский институт стали и сплавов  
119049, Москва, Россия*

**Т. В. Лосева**

*Институт динамики геосфер Российской академии наук  
119334, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 мая 2001 г.,  
после переработки 4 апреля 2002 г.

Исследованы эффекты резонансного и нерезонансного взаимодействия электронов со сферическими структурами, которые имеют пространственную периодичность в радиальном направлении — кластерами. Аналитически и с помощью численных расчетов показано, что фазовый сдвиг  $\delta_l$  волновой функции, возникающий при резонансном рассеянии электрона на такой периодической структуре достаточно большого радиуса  $r_0$ , не является малым даже при условии малости отношения амплитуды  $U_0$  периодического потенциала к энергии  $E$  рассеивающегося электрона ( $\varepsilon_0 = U_0/E \ll 1$ ) и равен  $|\delta_l| = \pi/4$  (по модулю  $\pi$ ). Это значение фазового сдвига соответствует предельному случаю большой величины параметра Борна для кластера,  $\xi_0 = r_0 U_0 / \hbar v \gg 1$ , где  $v$  — характерная скорость электрона. Аналитически рассмотрен эффект нерезонансного рассеяния электронов на периодическом потенциале, пространственный период которого несоизмерим с длиной бриллюэновской волны рассеивающегося электрона. Показано, что нерезонансное рассеяние формально оказывается эффектом более высокого порядка по параметру  $\varepsilon_0 \ll 1$  относительно резонансного рассеяния. Вычислено сечение рассеяния электрона на кластере, что позволяет оценить проводимость среды, содержащей кластеры.

PACS: 61.44.-n, 61.46.+w, 72.15.-v, 73.61.-r

1. В последнее время при обсуждении электронных транспортных свойств квазикристаллических пленок рассматривается возможность резонансного рассеяния электронов на кластерных структурах типа Al–Cu–Fe и Al–Pd–Re [1, 2]. Согласно [2], сильное рассеяние электронов на таких структурах возможно при условии, когда бриллюэновская длина волны рассеивающегося электрона совпадает с характерным пространственным масштабом такого кластера в радиальном направлении или кратна ему.

При этом, ввиду отсутствия точной периодичности в таких кластерах, в работах [1, 2] говорится о резонансе между длиной волны и подходящими характерными длинами. В [1] прямо отмечается аналогия между резонансным взаимодействием в квазикристаллах и явлениями в кристаллах, где резонансное взаимодействие создает энергетическую щель в спектре. Как следует из [2], такое рассеяние могло бы существенно уменьшить проводимость электронов в пленках, где возникают кластерные структуры [3–5]. В работах [3–5] описаны эксперименты, где проводимость пленок существенно падает после от-

\*E-mail: gordeev@dap.kiae.ru

жиги аморфной фазы и превращения ее в квазикристаллическую фазу, когда рентгеновские исследования демонстрируют появление высокой степени симметрии [3]. Все сказанное наводит на мысль, что возможны эффекты, связанные с резонансным рассеянием электронов на пространственной структуре, построенной аналогично луковице, где следующие друг за другом слои атомов образуют вложенные одна в другую сферы. В настоящей работе сделана попытка облечь приведенные выше качественные физические соображения, содержащиеся в работах [1, 2], в расчетную и аналитическую форму и построить модель для расчета рассеяния электронов в средах, содержащих кластерные структуры, причем ниже будут рассмотрены строго периодические кластеры.

Таким образом, приведенные выше общие теоретические представления указывают на то, что низкая проводимость среды в присутствии кластерных структур может быть связана с рассеянием электронов на кластерных структурах с высокой степенью упорядоченности в радиальном направлении. Воспользуемся для оценки проводимости  $\Sigma$  среды модификацией формулы Друде для твердого тела [6–8]

$$\Sigma = e^2 n_e \tau / m. \quad (1)$$

Здесь  $n_e$  — концентрация электронов,  $m$  — масса электрона,  $\tau$  — характерное время рассеяния электрона на кластерной структуре, причем

$$\tau^{-1} = n_c \langle \sigma v \rangle,$$

$n_c$  — число кластеров в единице объема,  $\sigma$  — сечение рассеяния электрона на кластере,  $v$  — скорость электронов, а скобки означают усреднение по распределению электронов по скоростям.

Ниже будет дана оценка сечения  $\sigma$  упругого рассеяния для резонансного рассеяния электронов на кластере. Скорость  $v$  электронов соответствует фермиевской границе в рассматриваемой среде [9] ввиду низких температур, при которых проводились измерения [4].

**2.** В настоящем разделе проведены некоторые оценки для сферических кластеров, причем в качестве первого шага при изучении резонансных эффектов рассмотрено рассеяние электронов на периодической по радиусу кластерной структуре. Для того чтобы в такой структуре оценить характерную потенциальную энергию, связанную с ионами, воспользуемся уравнением Пуассона для электрического поля  $E_r$  в кластере:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 E_r = 4\pi e (Z n_i - n_e), \quad (2)$$

где  $Z$  — заряд иона,  $n_i$  — концентрация ионов и предполагается сферическая симметрия.

Если считать, что ионы заполняют пространство по определенным сферическим поверхностям, отстоящим друг от друга в радиальном направлении на расстоянии  $\Delta$ , то из (2) следует оценка для амплитуды потенциальной энергии  $U$ :

$$U \sim \frac{4\pi}{3} Z n_i e^2 \Delta^2 \eta. \quad (3)$$

Здесь  $n_i$  — характерная ионная плотность на поверхности сферы радиуса  $R$ , а коэффициент  $\eta < 1$  соответствует нейтрализации ионного заряда электронами проводимости [10].

Если расположить  $N$  атомов на сфере радиуса  $R$ , то для средней ионной плотности справедлива оценка

$$n_i \sim N(R) / 4\pi R^2 \Delta. \quad (4)$$

Тогда, вводя поверхностную плотность ионов

$$\nu \equiv \frac{N(R)}{4\pi R^2}, \quad (5)$$

получим следующее выражение для потенциальной энергии:

$$U \sim \frac{4\pi}{3} Z e^2 \Delta \nu \eta. \quad (6)$$

В формуле (5) радиус  $R$  является фактически номером поверхности.

Как будет видно из дальнейших оценок, при рассеянии электрона на кластерной структуре выполняется неравенство  $E > U$ , где  $E$  — кинетическая энергия электрона,

$$E = \frac{1}{2m} \left( \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \right)^2, \quad (7)$$

так что при резонансе справедливо

$$n^2 = \frac{\lambda^2}{\Delta^2} < \frac{\pi a}{\nu \Delta^3 \eta}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (8)$$

Здесь введен боровский радиус

$$a = \hbar^2 / Z e^2 m. \quad (9)$$

**3.** Рассмотрим рассеяние электронов на отдельном кластере, в котором потенциал  $U(r)$  является периодической функцией радиуса  $r$ . В соответствии с общей теорией волновая функция, соответствующая рассеянию на центре, имеет асимптотический вид [11, 12]:

$$\psi \approx e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r} e^{ikr}, \quad (10)$$

где  $z$  — направление первоначального движения электронов, а  $\theta$  — угол между осью  $z$  и направлением рассеянной частицы.

Точное выражение для такой функции может быть представлено в виде ряда [11, 12]:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}, \quad A_l = \frac{1}{2k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}, \quad (11)$$

где  $P_l(\cos \theta)$  — сферические функции, а функция  $R_{kl}$  удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{dR_{kl}}{dr} + \left[ k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} U(r) \right] R_{kl} = 0, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (12)$$

и при больших  $r$  имеет следующую асимптотику:

$$R_{kl} \approx \frac{2}{r} \sin \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right), \quad (13)$$

причем фазовые сдвиги  $\delta_l$  определяют полное сечение рассеяния на рассеивающем центре:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (14)$$

Очевидно, что потенциальная энергия  $U(r)$  в уравнении (12) является суммой потенциальных энергий отдельных ионов, имеющих кулоновскую природу и расположенных на сферических поверхностях. Однако, имея в виду принятую выше сферическую симметрию, будем далее рассматривать функцию  $U(r)$  как некоторую плавную периодическую функцию  $r$ , в которой отсутствуют особенности кулоновского потенциала. Это соответствует подходу, основанному на методе ортогонализированных плоских волн в теории твердого тела [13], где волновые функции электронов, рассеивающихся на ионной решетке, ортогональны волновым функциям связанных электронов и не чувствуют особенностей кулоновского потенциала. Поэтому ниже в качестве потенциальной энергии  $U(r)$  используется периодическая функция без кулоновских особенностей, которая отлична от нуля при  $r \leq r_0$ :

$$U(r) = U_0 \cos \frac{2\pi r}{\Delta}, \quad U_0 = \text{const}, \quad (15)$$

и равна нулю при  $r > r_0$ . Здесь  $r_0$  — радиус кластера.

Вводя функцию  $y = rR_{kl}$  и новую переменную  $x = kr$ , представим уравнение (12) в виде

$$y'' + \left[ 1 - \frac{l(l+1)}{x^2} - \varepsilon \cos 2x \right] y = 0, \quad (16)$$

где  $\varepsilon = \varepsilon_0 \equiv U_0/E$  при  $x \leq x_0$  и  $\varepsilon = 0$  при  $x > x_0$ , а штрих означает производную по  $x$ . Здесь положено  $\lambda = 2\Delta$ , что удовлетворяет условию резонанса (см. формулу (8)).

Как следует из (6)–(8), величина  $\varepsilon_0 \sim 4\Delta^3 \nu \eta / \pi a$  выражается через универсальную функцию  $\nu$ . Так как кластер обычно группируется около какого-то центрального атома, то для функции  $\nu$  вблизи центрального атома из формулы (5) следует  $\nu \sim 1/4\pi\Delta^2$  и справедлива оценка  $\varepsilon_0 \sim \Delta\eta/\pi^2 a$ . Обычно  $\Delta$  порядка нескольких  $a$ , поэтому получается оценка  $\varepsilon_0 < 1$ , что находится в согласии с приведенным выше неравенством  $E > U$ .

Следует подчеркнуть, что потенциал ионного остова положителен, однако ввиду наличия нейтрализующего электронного фона среднее значение потенциала  $U$  кластера в формуле (2) равно нулю.

При  $l = 0$  уравнение (16) является частным случаем (для  $\varphi = \pi$ ) уравнения

$$y'' + [1 + \varepsilon \cos(2x + \varphi)] y = 0, \quad (17)$$

которое при  $\varphi = 0$  переходит в уравнение Матье [14, 15].

Таким образом, далее будет рассматриваться уравнение (17) при  $\varepsilon < 1$ , которое описывает надбарьерное рассеяние электронов на периодической по радиусу кластерной структуре при  $l = 0$ . Уравнение (17) является уравнением типа Матье, причем ввиду заданного значения  $\varepsilon$ , определяемого физикой задачи, возникающие решения уравнения (17) не являются периодическими. Теория, исследующая непериодические решения уравнения Матье, в общем виде изложена в работе [15]. При этом уравнение (16) фактически является обобщением уравнения Матье на случай  $l \neq 0$ . Ниже вычисление фазового сдвига при помощи уравнения (16) будет проведено как прямыми численными расчетами, так и аналитически, разложением решений уравнения (16) в ряд по параметру  $\varepsilon x$ .

4. Уравнения (16) и (17) исследовались в настоящей работе численно и аналитически для нескольких значений  $\varepsilon_0 < 1$  и в широкой области изменения безразмерного радиуса  $x_0$  кластера. Это соответствует надбарьерному рассеянию электрона на сферической структуре с периодическим потенциалом, которое связано с резонансом между пространственным периодом структуры и бриллюэновской длиной волны рассеивающихся электронов.

Математическая постановка задачи для уравнений (16) и (17) была следующей. При  $x = x_0$  «внешнее» решение вида  $y = \sin(x + \delta_l - l\pi/2)$  и его производная сшивались с решением уравнения (16) (или

(17)) внутри интервала  $0 \leq x \leq x_0$ , на которое накладывалось дополнительное условие  $y = 0$  в центре кластера  $x = 0$  [11,12]:

$$\begin{aligned} y(x_0) &= \sin(x_0 + \delta_l - l\pi/2), \\ y'(x_0) &= \cos(x_0 + \delta_l - l\pi/2), \\ y(0) &= 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Эти граничные условия позволяют найти решение уравнений (16) и (17) и фазовый сдвиг  $\delta_l$ .

Рассмотрим сначала решение уравнения (17) для случая  $l = 0$ . На рис. 1 приведены для иллюстрации результаты расчета фазы  $\delta_0$ , соответствующей  $l = 0$ , в зависимости от безразмерного радиуса кластера  $x_0$  для двух значений  $\varepsilon_0$ . Вычисления выполнялись для значений  $\varepsilon_0$ , равных 0.5 и 0.1, при  $x_0 > 100$ . Было обнаружено, что при этих условиях фаза  $\delta_0$  испытывает быстрые осцилляции и, кроме того, монотонное изменение (увеличение или уменьшение), начиная от значения  $\delta_0(x_0 = 0) = \pi$ , которое соответствует условию отражения волны в центре кластера. По мере увеличения  $x_0$  изменение фазы увеличивается, что соответствует усилению эффекта рассеяния электрона на кластере. Весь массив данных, полученных в результате проведенных численных расчетов, может быть достаточно хорошо аппроксимирован формулой [16]

$$\delta_0 = \pi + f_1 \frac{\pi}{16} \varepsilon_0 \sin(2x_0 + \varphi) - f_2 \frac{\pi}{4} \cos \varphi \operatorname{th} \frac{x_0 \varepsilon_0}{\pi}. \quad (19)$$

На рис. 1 жирными линиями показаны расчетные кривые, а тонкими линиями — значения фазы  $\delta_0$ , вычисленные по формуле (19) при  $\varphi = 0$  и  $\varphi = \pi$  для  $f_i \equiv f_i(\cos^2 \varphi, \varepsilon_0) = 1$ , соответствующие значениям параметра  $\varepsilon_0 = 0.1$  и 0.5. Видно хорошее соответствие этой формулы результатам расчета. Столь же хорошее соответствие имеется для  $\varphi = \pi/2$ . При промежуточных значениях  $\varphi$  в формуле (19) должны быть учтены значения  $f_i$ , несколько отличающиеся от единицы.

Главной особенностью формулы (19) является универсальное значение фазового сдвига при рассеянии, соответствующее большим размерам кластера,  $x_0 \gg 1$ . Как видно из сравнения результатов расчета и аппроксимации (19), это изменение фазы, равное с хорошей точностью  $\pi/4$  (по модулю  $\pi$ ), при достаточно большом  $x_0$  слабо зависит от величины  $\varepsilon_0$  и сохраняется даже для  $\varepsilon_0 \ll 1$ . Из (19) следует, что такое значение фазы  $\delta_0$  формируется на размере  $x_0 \sim 3\pi/\varepsilon_0$ . Это является следствием пространственного резонанса между бриллюэновской длиной волны  $\lambda = 2\pi/k$  и пространственным периодом кластера  $\Delta$ .

5. Выше в п. 4 численными расчетами показано, что в пределе  $x_0 = kr_0 \rightarrow \infty$  ( $r_0$  — геометрический размер кластера) фазовый сдвиг  $\delta_0$  для нулевого углового момента равен  $\pi/4$  (по модулю  $\pi$ ). Однако для оценки полного сечения рассеяния нужно найти фазовые сдвиги  $\delta_l$  для  $l \neq 0$ . В этом случае при рассеянии электрона на кластере характерному прицельному параметру  $r_0$  соответствует [11]

$$l \approx \frac{r_0 mv}{\hbar} = kr_0 \frac{mv}{\hbar} = x_0. \quad (20)$$

Поэтому при  $x_0 \gg 1$  величина сечения определяется предельным значением  $l_{max} \approx x_0$ . В этом пункте представлены результаты численных расчетов уравнения (16) для граничных условий (18) при  $l \neq 0$ . Расчеты показывают, что в асимптотическом случае  $x_0 \gg 1$  значения фазового сдвига по модулю  $\pi$  совпадают по абсолютной величине для всех  $l$ . При этом значения фазового сдвига могут быть аппроксимированы выражением

$$\delta_l \approx \pi + (-1)^l \frac{\pi}{4}. \quad (21)$$

Для иллюстрации на рис. 2 представлены значения фазового сдвига  $\delta_l$  для нескольких первых значений  $l$ . Все различие в формировании фазового сдвига заключается в том, что при увеличении  $l$  выход на асимптотику происходит при больших  $x$ . Это означает, что при  $l \gg 1$  выражение для сечения  $\sigma$  (14) при учете (21) принимает вид

$$\sigma \approx 2\pi r_0^2 l_{max}^2 / x_0^2. \quad (22)$$

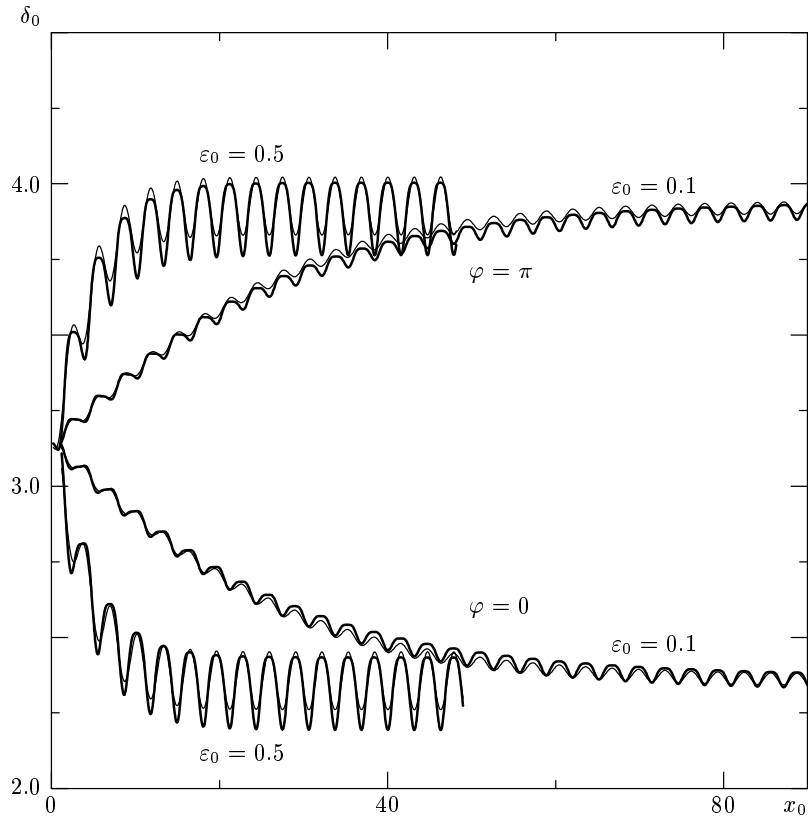
Ввиду указанной выше оценки ( $l_{max} \approx x_0$ ) это приводит к значению для сечения рассеяния  $\sigma = 2\pi r_0^2$ , которое соответствует «оптическому» приближению при большой величине параметра Борна [11]:

$$\xi_0 = \frac{r_0 U_0}{\hbar v} \sim \frac{U_0}{E} \frac{r_0 mv}{\hbar} \approx \varepsilon_0 l \gg 1. \quad (23)$$

Отметим, что хотя полученное выражение для сечения рассеяния электрона на периодической структуре совпадает с сечением рассеяния на поглощающей сфере, это сечение складывается из резонансного рассеяния электрона на периодической структуре кластера для различных  $l$ , и задача не может быть поставлена с самого начала как рассеяние на «твердой» сфере.

Если в формуле (1) для проводимости положить радиус кластера  $r_0 \sim 10^{-5}$  см и характерную скорость электронов  $v \approx 3 \cdot 10^7$  см/с, соответствующую энергии Ферми для плотности проводящих электронов порядка  $10^{21}$  см $^{-3}$  [3], то выражение для проводимости примет вид

$$\Sigma [\text{ед. СГС}] \approx 2.5 \cdot 10^{10} n_e / n_c. \quad (24)$$



**Рис. 1.** Зависимость фазового сдвига  $\delta_0$  от радиального размера структуры,  $x_0 = kr_0$ , для двух различных значений  $\varepsilon_0 = U_0/E$  и для двух значений  $\varphi = 0, \pi$  в формуле (17) при рассеянии электрона на периодической структуре

Наблюдаемое в работе [4] значение проводимости порядка  $300 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$  соответствует в единицах СГС величине  $2.7 \cdot 10^{14}$ . Это может реализоваться, если число электронов, приходящихся на один кластер,  $n_e/n_c$  порядка  $10^4$ .

**6.** Теперь получим аналитическое обоснование формулы (21) для  $l \geq 1$ . Для этого представим дифференциальное уравнение (16) в следующей интегральной форме:

$$\begin{aligned}
 y(x) = & C_0 \sqrt{x} J_{l+1/2}(x) - \varepsilon \frac{\pi}{2} \sqrt{x} J_{l+1/2}(x) \times \\
 & \times \int_0^x dx' \cos(2x') \sqrt{x'} N_{l+1/2}(x') y(x') + \\
 & + \varepsilon \frac{\pi}{2} \sqrt{x} N_{l+1/2}(x) \times \\
 & \times \int_0^x dx' \cos(2x') \sqrt{x'} J_{l+1/2}(x') y(x'), \quad (25)
 \end{aligned}$$

где  $J_\nu$  и  $N_\nu$  — функции Бесселя и Неймана [17].

При  $\varepsilon = 0$  решение уравнения (16) имеет вид

$$y(x) = C_0 \sqrt{x} J_{l+1/2}(x)$$

и удовлетворяет условию  $y(0) = 0$ . Из формулы (25) следует, что члены, пропорциональные  $\varepsilon$ , могут быть существенными при  $\varepsilon \ll 1$ , так как реальным параметром разложения задачи является  $\varepsilon x$ . Поэтому, вообще говоря, в уравнении (25) следует учитывать бесконечный ряд по параметру  $\varepsilon x$ .

Исходя из интегрального уравнения (25), продемонстрируем простой способ получения наиболее существенного, неосциллирующего, вклада в фазовый сдвиг  $\delta_l$ . Для этого будем последовательно подставлять выражение для  $y$  в правую часть уравнения (25), получая таким образом все увеличивающееся количество цепочек кратных интегралов произвольного порядка по параметру  $\varepsilon$ . При этом среди таких цепочек кратных интегралов с данным порядком  $p$  неосциллирующему вкладу соответствует единственная цепочка, содержащая под интегралами только квадраты цилиндрических функций. Используя при вычислении кратных интегралов

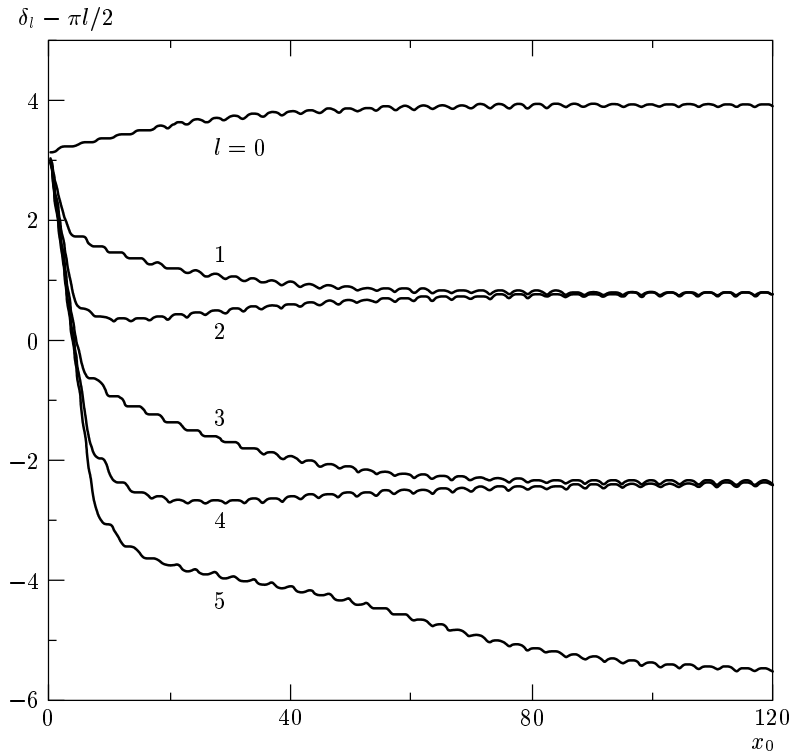


Рис. 2. Зависимость фазового сдвига  $\delta_l$  для первых шести значений  $l$  от радиального размера структуры  $x_0 = kr_0$  при  $\varepsilon_0 \equiv U_0/E = 0.1$

асимптотики цилиндрических функций для больших  $x$ , можно получить простые выражения для коэффициентов при  $J_\nu$  и  $N_\nu$  в решении  $y(x)$  вблизи  $x = x_0$ .

Нетрудно видеть, что в цепочке последовательных интегрирований в каждом из интегралов стоит одно из выражений

$$g_1(x) = xJ_{l+1/2}(x)N_{l+1/2}(x), \quad g_2(x) = xJ_{l+1/2}^2(x),$$

$$g_3(x) = xN_{l+1/2}^2(x),$$

умноженное на  $\cos 2x$ . Очевидно, что для неосциллирующей части фазового сдвига  $\bar{\delta}_l$  в данном порядке  $p$  по  $\varepsilon$  следует учитывать единственную цепочку кратных интегралов, где под интегралами стоят только квадратичные члены по  $J_{l+1/2}(x)$  или  $N_{l+1/2}(x)$ . Рассмотрение таких цепочек кратных интегралов в каждом последовательном порядке  $p$  по параметру  $\varepsilon$  показывает, что ввиду разных знаков перед интегральными членами в уравнении (25) при нечетных порядках по  $\varepsilon$  ( $p = 2q + 1$ ) возникает член  $\sqrt{x}N_{l+1/2}(x)$ , умноженный на  $(-1)^{(p-1)/2}$ , а в четных порядках по  $\varepsilon$  ( $p = 2q$ ) — член

$\sqrt{x}J_{l+1/2}(x)$ , умноженный на  $(-1)^{p/2}$ . При этом, поскольку невозмущенным решением в формуле (25) является  $\sqrt{x}J_{l+1/2}(x)$ , в подынтегральных выражениях при функции  $\sqrt{x}N_{l+1/2}(x)$  преобладают множители  $xJ_{l+1/2}^2(x)$ , а при функции  $\sqrt{x}J_{l+1/2}(x)$  имеется одинаковое количество множителей  $xJ_{l+1/2}^2(x)$  и  $xN_{l+1/2}^2(x)$ . Заметим, что в асимптотическом случае  $x \gg l \geq 1$  произведение  $(\pi/2)xJ_{l+1/2}^2(x) \cos 2x$  дает множитель  $(-1)^{l+1}/4$ , а  $(\pi/2)xN_{l+1/2}^2(x) \cos 2x$  — множитель  $(-1)^l/4$ .

Так как при вычислении неосциллирующего члена интегрирование последовательных степеней  $x$  дает  $1/p!$ , общим членом при произвольном  $p$  является  $(-1)^{lp}(\varepsilon x/4)^p/p!$ . Ясно, что множитель  $(-1)^{lp}$  следует учитывать только при нечетном  $p$ , причем в этом случае  $(-1)^{lp} \equiv (-1)^l$ . В результате оказывается, что все неосциллирующие члены при функции  $\sqrt{x}J_{l+1/2}(x)$  не имеют множителя  $(-1)^l$ , а при функции  $\sqrt{x}N_{l+1/2}(x)$  содержат множитель  $(-1)^l$ .

Собирая численные коэффициенты и знаки при неосциллирующих членах, полученных в результате последовательных интегрирований, получим

$$\bar{y}(x) = C_0 \sqrt{x} J_{l+1/2}(x) \operatorname{ch} \frac{\varepsilon_0 x}{4} - (-1)^l C_0 \sqrt{x} N_{l+1/2}(x) \operatorname{sh} \frac{\varepsilon_0 x}{4}. \quad (26)$$

Используя асимптотические выражения для цилиндрических функций [17] в области  $x \gg l \geq 1$ , можно привести выражение (26) к виду

$$\bar{y}(x) = C_0 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left( \operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon_0 x}{4} + \operatorname{sh}^2 \frac{\varepsilon_0 x}{4} \right) \times \sin \left( x - l \frac{\pi}{2} + \bar{\delta}_l \right). \quad (27)$$

Здесь неосциллирующая часть фазового сдвига равна

$$\bar{\delta}_l = (-1)^l \operatorname{arctg} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_0 x}{4}. \quad (28)$$

Осциллирующая часть фазового сдвига  $\delta_l$  содержит малость  $\varepsilon_0 \ll 1$  и в этой формуле не учитывается.

Сделаем два замечания. Во-первых, при выводе выражения (28) для  $\bar{\delta}_l$  считалось, что  $x \gg l$ . В то же время при суммировании в формуле (14) используются асимптотические значения фазового сдвига вплоть до  $l \leq x$ . Рассмотрение асимптотических выражений для цилиндрических функций при  $l \leq x$  показывает, что переход к этому пределу непрерывный и указанная неточность лишь слабо влияет на конечный результат суммирования. Во-вторых, из вида неосциллирующей функции  $\bar{y}(x)$  согласно выражению (27) следует, что модуль функции  $\bar{y}(x)$  экспоненциально растет при приближении к границе области, и может возникнуть впечатление, что форма границы существенно влияет на рассмотренный эффект. Однако нетрудно убедиться, что величина фазового сдвига  $\delta_l$  формируется в области  $x \ll x_0$ , где влияние формы границы на изменение фазового сдвига пренебрежимо мало.

Следует отметить, что выражение для  $\bar{\delta}_l$  в пределе  $x \rightarrow \infty$  переходит в формулу (21). Следуя проведенным вычислениям, легко убедиться, что формула (28) описывает и случай  $l = 0$ , однако для  $\delta_0$  оставлено выражение (19), приведенное в работе [16], тем более что представленная для  $\delta_0$  аппроксимация не сильно отличается от полученного выражения для  $\bar{\delta}_l$  при  $l = 0$  (наибольшее расхождение этих функций в области  $\varepsilon_0 x/4 \sim 1$  составляет не более 3%).

Уравнение (16) является обобщением на случай  $l \neq 0$  обычного уравнения Маттье, причем здесь используются неперриодические решения этого уравнения.

7. Выше считалось, что потенциалу в формуле (15) соответствует резонансный член  $\cos 2x$ . Однако точный резонанс достигается только для частиц из очень узкого диапазона энергий. Поэтому ниже будет рассмотрено рассеяние электронов на потенциале, не удовлетворяющем условию резонанса. В этом пункте приведен расчет фазового сдвига для случая, когда в потенциале имеется нерезонансный член  $\cos(\lambda x)$ , где  $\lambda$  является иррациональным числом, так что резонанс отсутствует в принципе во всех порядках. Конечно, это является некоторой идеализацией, но такое приближение позволит вычислить усредненный по пространственным осцилляциям нерезонансный вклад в рассеяние во всех порядках по параметру  $\varepsilon$ .

В рамках введенного предположения вычислим фазовый сдвиг только для случая  $l = 0$ , чтобы выяснить порядок возникающего эффекта. Пользуясь введенным предположением, будем считать, что усреднение по пространству от произвольного числа сомножителей тригонометрических функций вида  $\cos(\lambda x)$  с иррациональными  $\lambda$  и тригонометрических функций вида  $\sin(sx)$  или  $\cos(sx)$  с рациональными  $s$  всегда происходит независимо. Вычислим эффект рассеяния в этом приближении, пользуясь интегральным представлением  $y(x)$  аналогично формуле (25), но для  $l = 0$ . Ввиду нерезонансного характера рассеяния далее полезно выписать интегральное представление решения с точностью до членов порядка  $\varepsilon^2$ :

$$y(x) = C_0 \sin x - \varepsilon \sin x \int_0^x dx' \cos x' \cos(\lambda x') \times \\ \times \left[ C_0 \sin x' - \varepsilon \sin x' \int_0^{x'} dx'' \cos x'' \cos(\lambda x'') y(x'') + \right. \\ \left. + \varepsilon \cos x' \int_0^{x'} dx'' \sin x'' \cos(\lambda x'') y(x'') \right] + \\ + \varepsilon \cos x \int_0^x dx' \sin x' \cos(\lambda x') \times \\ \times \left[ C_0 \sin x' - \varepsilon \sin x' \int_0^{x'} dx'' \cos x'' \cos(\lambda x'') y(x'') + \right. \\ \left. + \varepsilon \cos x' \int_0^{x'} dx'' \sin x'' \cos(\lambda x'') y(x'') \right]. \quad (29)$$

Здесь сразу же следует отметить, что в нерезонансном приближении одна степень  $x$  возникает

только из двух последовательных интегрирований, поэтому параметром разложения в данном случае является величина  $\varepsilon^2 x$ . Действительно, степень  $x$  появится только тогда, когда в двух последовательных интегралах кроме обязательного  $\cos(\lambda x)$  стоят подынтегральные выражения двух существенно различных типов:  $\sin x \cos x$  или  $\cos^2 x$  ( $\sin^2 x$ ). В рассматриваемом приближении множители  $\sin^2 x$  и  $\cos^2 x$  дают одинаковый вклад с точностью до знака. Нетрудно убедиться, что в выражении (29) в квадратичном приближении по  $\varepsilon$  ненулевому вкладу соответствует только вторая часть выражения для  $y(x)$ , пропорциональная  $\cos x$ .

Для вычисления более высоких четных порядков по  $\varepsilon$  необходимо последовательно подставлять выражение для  $y(x)$  в правую часть формулы (29). Для упрощения однотипных вычислений каждую цепочку кратных интегралов будем символически характеризовать стоящими перед последовательными интегралами множителями,  $\sin x$  или  $\cos x$ . Тогда при вычисления цепочки, начинающейся функцией  $\sin x$  и дающей максимальное количество степеней  $x$  при усреднении по пространству, внутри блока, соответствующего второму порядку по  $\varepsilon$ , необходимо выбирать только следующие последовательности тригонометрических функций перед интегралами:

$$\sin x, \cos x \text{ или } \cos x, \cos x. \tag{30}$$

Для вычисления блока, начинающегося множителем  $\cos x$ , необходимо выбрать другие последовательности тригонометрических функций перед интегралами:

$$\sin x, \sin x \text{ или } \cos x, \sin x. \tag{31}$$

Заметим, что множитель  $\sin x$ , стоящий на последнем месте в последовательностях (31) в блоке низшего порядка разложения (29), не соответствует какому-то интегралу. При этом все остальные множители  $\sin x$  в последовательностях (30) и (31) имеют знак «минус» в силу уравнения (29).

Следует подчеркнуть, что при переходе к следующему порядку по  $\varepsilon^2$  каждый раз число членов удваивается. Чтобы показать это, введем матричное обозначение для каждого из блоков второго порядка с учетом знаков, следующих из (29). Тогда исходному блоку второго порядка по  $\varepsilon$  будет соответствовать матрица

$$\begin{pmatrix} -\sin x & \sin x \\ \cos x & \sin x \end{pmatrix}, \tag{32}$$

а четвертому порядку по  $\varepsilon$  — последовательность матриц

$$-\begin{pmatrix} -\sin x & \cos x \\ \cos x & \cos x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin x & \sin x \\ \cos x & \sin x \end{pmatrix}. \tag{33}$$

Знак «минус» перед последовательностью матриц (33) берется из множителя  $-\sin x$ , стоящего перед членом четвертого порядка в уравнении (29).

(Особо отметим, что здесь и далее перемножать матрицы не имеет смысла!)

Полученная матричная структура (32) позволяет выполнить вычисления во втором порядке по параметру  $\varepsilon$ . В каждом из блоков сначала первое интегрирование должно изменить  $\sin[(2 \pm \lambda)x]$  на  $\cos[(2 \pm \lambda)x]$  с изменением знака или  $\cos[(2 \pm \lambda)x]$  на  $\sin[(2 \pm \lambda)x]$  без изменения знака. При этом возникают квадратичные члены по тригонометрическим функциям, которые затем усредняются по пространству в результате интегрирования.

Таким образом, матрице (32) соответствует член

$$-\frac{1}{2} \frac{\varepsilon^2 x}{16} \frac{4}{4 - \lambda^2}, \tag{34}$$

где появление множителя  $1/2$  связано с усреднением квадратов тригонометрических функций.

Как отмечалось выше, две строчки матрицы приводят к удвоению результата, так что возникающий в формуле (34) множитель  $1/2$  исчезает. Это происходит при вычислении каждого блока ввиду присутствия двух строчек в соответствующей матрице.

Вычисления, соответствующие последовательности матриц (33), приводят с учетом сказанного выше к следующему результату:

$$-\frac{1}{2} \left[ \frac{\varepsilon^2 x}{4(4 - \lambda^2)} \right]^2, \tag{35}$$

где множитель  $1/2$  связан с повторным интегрированием по  $x$ .

Из изложенного выше следует, что вклад второго порядка является множителем при  $\cos x$ , а вклад четвертого порядка — при  $\sin x$ . Нетрудно убедиться, что эта закономерность сохранится и в последующих порядках, так что при  $\cos x$  будут стоять члены вида  $\varepsilon^{2(2q+1)}$ , а при  $\sin x$  — вида  $\varepsilon^{4q}$ , где  $q$  — натуральное число.

Применим полученные правила для вычисления вклада шестого порядка по параметру  $\varepsilon$ , который стоит при  $\cos x$ . Непосредственно с помощью формулы (29) последовательными итерациями нетрудно убедиться, что возникает структура последовательных цепочек кратных интегралов, которую можно представить в виде следующей последовательности матриц:



$$-\begin{pmatrix} -\sin x & \sin x \\ \cos x & \sin x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin x & \cos x \\ \cos x & \cos x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin x & \sin x \\ \cos x & \sin x \end{pmatrix}. \quad (36)$$

Здесь знак «минус», соответствующий предынтегральным множителям  $\sin x$  в крайней левой матрице, вынесен перед последовательностью матриц, чтобы ограничиться введением всего двух базисных матриц. Вычисления, аналогичные предыдущему, приводят к результату

$$\frac{1}{6} \left[ \frac{\varepsilon^2 x}{4(4 - \lambda^2)} \right]^3. \quad (37)$$

Полученная последовательность матриц (36) наводит на мысль, что вычисление вклада произвольного порядка  $p$  по  $\varepsilon^2 x$  сводится к рассмотрению всего лишь двух базисных матриц, строго чередующихся между собой и образующих последовательность из  $p$  матриц. Можно убедиться, что эта закономерность оправдывается и для более высоких порядков. Из вычислений видно, что каждая базисная матрица приводит к множителю  $-\varepsilon^2 x / [4(4 - \lambda^2)]$ . При этом последовательные интегрирования по  $x$  увеличивают степень  $x$  на единицу, и при вычислении вклада порядка  $p$  по параметру  $\varepsilon^2 x$  возникает множитель  $1/p!$ .

Суммирование членов всех порядков по параметру  $\varepsilon^2 x$  при учете их знаков дает следующий окончательный результат:

$$y = C_0 \sin \left[ x - \frac{\varepsilon_0^2 x}{4(4 - \lambda^2)} \right]. \quad (38)$$

Таким образом, выражение для нерезонансной фазы, усредненной по быстрым пространственным осцилляциям, оказывается величиной более высокого порядка по параметру  $\varepsilon_0 \ll 1$  по сравнению с резонансной фазой<sup>1)</sup>. Кроме того, при усреднении полученного выражения для нерезонансной фазы по распределению электронных скоростей происходит взаимная компенсация вкладов от электронов с противоположными сдвигами по отношению к резонансной энергии. При этом, естественно, отсутствует экспоненциальное нарастание амплитуды волновой функции.

**8.** Подчеркнем, что рассмотренный эффект формирования резонансного фазового сдвига на периодическом потенциале  $U$  не может быть получен

из широко известной формулы для фазового сдвига  $\delta_l$  волновой функции при больших значениях  $l \gg 1$  [11, 18]:

$$\delta_l = - \int_{r_*}^{\infty} \frac{mU(r)dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - (l + 1/2)^2/r^2}}, \quad (39)$$

где  $r_*$  — корень подкоренного выражения.

Видно, что если функция  $U(r)$  на бесконечности убывает медленнее, чем  $1/r$ , то фаза  $\delta_l$  оказывается формально бесконечной (фактически неопределенной!) и не может быть вычислена для рассматриваемого потенциала  $U(r)$  из формулы (15). Между тем выше с помощью численных расчетов и аналитически было показано, что асимптотически при  $x_0 \gg 1$  все значения  $\delta_l$  конечны и определяются формулой (21). Как следует из численных расчетов для уравнения (17), которое относится к уравнению типа Маттье, асимптотическое значение фазы  $\delta_0$  не меняется при уменьшении  $\varepsilon_0$ , причем формирование этого фазового сдвига происходит на расстоянии порядка  $x_0 \sim 1/\varepsilon_0$ . Из характера неперiodических решений уравнения Маттье следует, что формирование фазового сдвига происходит в результате накопления малых резонансных эффектов на последовательных периодах и связано с параметрическим резонансом [15]. При этом именно бесконечный ряд по степеням  $\varepsilon x$  формирует неперiodическую функцию типа Маттье, что обеспечивает определенное конечное значение результирующего фазового сдвига  $\delta_l$ . Конечно, в данном случае речь идет о пространственном резонансе между бриллюэновской длиной волны и периодом кластерной структуры. Расчет  $\delta_l$  для уравнения (16) в случае  $l \neq 0$  показывает, что в асимптотическом пределе  $x_0 \rightarrow \infty$  абсолютное значение фазового сдвига (по модулю  $\pi$ ) является универсальной константой. Как следует из аналитического расчета, фазовый сдвиг  $\delta_l$  формируется как раз в области, где подкоренное выражение в формуле (39) отрицательно. Таким образом, формула (39) не применима к кластеру с потенциалом (15), потому что при вычислении фазового сдвига  $\delta_l$  в квазиклассическом подходе исключается основной вклад от большой области  $x_0 \sim l$ .

<sup>1)</sup> Отметим, что согласно проведенным расчетам быстрые пространственные осцилляции нерезонансной фазы имеют значительную амплитуду.

9. Кратко обсудим полученные результаты. В соответствии с работой [8] характерное время релаксации  $\tau$  отождествляется с характерным временем резонансного рассеяния электрона на кластере. Это характерное время существенно определяется количеством кластеров  $n_c$  в единице объема. В случае выбранных ранее кластеров размером порядка  $10^{-5}$  см [1, 19] содержится примерно  $3 \cdot 10^7$  атомов. При этом на один атом приходится менее  $10^{-3}$  электронов, что является типичным для икосаэдрических кристаллов [20]. Здесь следует подчеркнуть, что в настоящей статье концентрация кластеров  $n_c$  является свободным параметром. Однако, согласно работе [1], свойства тонких пленок мало отличаются от свойств квазикристаллических образцов больших размеров. Такие пленки имеют преимущества при изготовлении образцов и измерении их свойств, а также позволяют легко осуществить переход от аморфной фазы к икосаэдрической. Поэтому икосаэдрическая фаза в обоих случаях может рассматриваться как система взаимопроникающих кластеров, т. е. весь квазикристаллический образец можно считать состоящим из кластеров как элементарных структур. В этом случае выбор  $n_c$  должен производиться согласованно. Тогда характерный размер кластера может фиксироваться нарушением пространственной симметрии или неупругими столкновениями [1]. При этом существенно, чтобы доминировало упругое рассеяние, что реализуется при очень низких температурах порядка нескольких градусов Кельвина [1, 21].

Из представленного выше аналитического расчета следует, что при резонансном рассеянии электрона на периодическом кластере квадрат волновой функции  $|\psi|^2$  экспоненциально растет к границе кластера, так что возникает экспоненциальная локализация электронной плотности на границе кластера:

$$|\psi(r)|^2 \propto e^{\xi(r)}, \quad (40)$$

где  $\xi(r) = rU_0/\hbar v$  — зависящий от координаты параметр Борна.

Однако получающееся значение фазы  $\delta_l$  не чувствительно к форме границы кластера, так как значение  $\delta_l$  формируется уже при  $x \sim 3\pi/\varepsilon_0$ , т. е. вдали от границы кластера.

Ввиду справедливости соотношения  $E > U$  для типичной кластерной структуры предложенный метод позволяет рассчитывать резонансное рассеяние электронов вблизи поверхности Ферми на структуре, состоящей из кластеров с малой амплитудой  $U_0$  потенциала, но при больших размерах  $r_0$  клас-

тера. В квазикристаллах с доминирующим упругим рассеянием это может приводить к локализации электронов, что проявляется в переходе металл–диэлектрик. При этом предложенный способ вычисления сечения рассеяния мог бы стать альтернативой общепринятому методу расчета, в частности, при нахождении проводимости квазикристаллов с помощью аппроксимант [20]. В самом деле, если предельное значение  $\delta_l$  формируется уже при  $x \sim 3\pi/\varepsilon_0$ , то нет смысла рассматривать аппроксиманты существенно большего размера.

10. В работе показано, что для периодических по радиусу сферических структур существует сильное надбарьерное резонансное рассеяние электронов даже при малом отношении потенциальной энергии периодического кластера к энергии налетающего электрона,  $\varepsilon = U/E \ll 1$ , что связано с резонансом между электронной бриллюэновской волной и пространственным масштабом кластера. Фазовые сдвиги  $\delta_l$  при таком резонансном рассеянии получены как аналитически, так и прямыми численными расчетами. В случае нулевого углового момента электрона,  $l = 0$ , предложена формула для фазового сдвига, которая с хорошей точностью воспроизводит результаты расчета при малом отношении потенциальной энергии кластера к кинетической энергии электрона для различных размеров кластера. Эта аппроксимация, приведенная в [16], полностью согласуется с аналитическим расчетом. Показано, что в этом случае имеется универсальный сдвиг фазы, равный  $\pi/4$  (по модулю  $\pi$ ), который реализуется для кластера достаточно большого размера. Найдены значения фазового сдвига для  $l \neq 0$  и вычислено сечение рассеяния электронов на таком кластере. Полученные значения сечения дают возможность оценить проводимость электронного газа в среде, заполненной кластерами с периодической по радиусу структурой. Значения проводимости, следующие из формулы (24), не противоречат экспериментально полученной величине проводимости, приведенной в работах [4, 5], при числе электронов проводимости, приходящихся на один кластер, равном  $n_e/n_c \sim 10^4$ .

Предварительные расчеты показывают, что нарушение периодичности в потенциале  $U(r)$  — «сбои» фазы в выражении для потенциала  $U(r)$  из формулы (15) — приводят к уменьшению фазового сдвига при рассеянии. Расчеты фазового сдвига для кластеров со структурой потенциала  $U(r)$ , соответствующей квазикристаллам, могут быть выполнены методом, аналогичным рассмотренному выше. Однако о количественном сравнении предложенного подхода с результатами экспериментов

можно говорить только после рассмотрения рассеяния электронов на самоподобных кластерах.

Авторы выражают благодарность В. И. Когану за полезные замечания.

## ЛИТЕРАТУРА

1. R. Haberkern, in *Quasicrystals — an Introduction to Structures, Physical Properties and Applications*, ed. by J.-B. Suck, M. Schreiber, and P. Häussler, Springer, Berlin–Heidelberg–New York (2001), p. 364.
2. J. Barzola-Quiquia, M. Lang, R. Haberkern, and P. Häussler, in *Aperiodic Structures*, University of Mining and Metallurgy, Krakow (2001), p. 11.
3. T. Klein, A. Gozlan, C. Berger et al., *Europhys. Lett.* **13**, 129 (1990).
4. R. Haberkern, C. Roth, R. Knöfler, F. Zavaliche, and P. Häussler, in *Proceedings of the 6th Int. Conf. on Quasicrystals*, eds. by S. Takeuchi and T. Fujiwara, World Scientific, Singapore (1998), p. 643.
5. F. S. Pierce, S. J. Poon, and Q. Guo, *Science* **261**, 737 (1993).
6. C. Janot, *Phys. Rev. B* **53**, 181 (1996).
7. B. D. Basov, T. Timusk, F. Barakat, J. Greedan, and B. Brushko, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 1937 (1994).
8. Дж. Займан, *Принципы теории твердого тела*, Мир, Москва (1974).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика* (ч. 1), Наука, Москва (1976), с. 188.
10. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978), с. 290.
11. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1989), с. 585.
12. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
13. У. Харрисон, *Теория твердого тела*, Мир, Москва (1972), с. 99.
14. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции, функции Ламе и Матье*, Наука, Москва (1967).
15. В. А. Якубович, В. М. Старжинский, *Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения*, Наука, Москва (1972), с. 718.
16. А. В. Гордеев, И. А. Гордеев, Т. В. Лосева, Препринт ИАЭ-6241/1, Москва (2001).
17. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, рядов, сумм и произведений*, Наука, Москва (1971).
18. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, т. 1, Мир, Москва (1974).
19. C. Janot, *J. Phys.: Condens. Matter* **9**, 1493 (1997).
20. S. J. Poon, *Adv. Phys.* **41**, 303 (1992).
21. R. Haberkern, G. Fritsch, and J. Schilling, *Z. Phys. B* **92**, 383 (1993).