

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ МЕТАЛЛОВ

II. СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА И ТЕРМОДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНОВ
В МЕТАЛЛАХ *)

И. М. Лифшиц, М. И. Каганов

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	411
§ 1. Энергия Ферми. Поверхность Ферми. Число электронов	412
§ 2. Плотность электронных состояний на единичный интервал энергий	421
§ 3. Термодинамика электронов проводимости	425
§ 4. Об аномалиях электронных характеристик металла в области больших давлений	428
§ 5. Пара- и диамагнетизм (слабые магнитные поля)	433
§ 6. Эффект де-Гааза — ван-Альфона (сильные магнитные поля)	435
§ 7. Де-гааз-ван-альфон-эффект и теория ферми-жидкости	443
§ 8. Эффект де-Гааза — ван-Альфона (специальные вопросы)	447
§ 9. Определение электронного энергетического спектра по экспериментальным данным	450
§ 10. Общая теория осцилляционных явлений	454
Приложение	455
1. К вопросу об определении понятия эффективной массы электрона проводимости	455
2. Движение в переменном и неоднородном электромагнитном поле	456
3. Квазиклассическое квантование вблизи особых классических траекторий	459
Цитированная литература	460

ВВЕДЕНИЕ

В настоящем обзоре рассмотрены термодинамически равновесные свойства металлов при низких температурах. При этом основное внимание уделено тем явлениям и свойствам, которые чувствительны к закону дисперсии электронов проводимости.

Изложение строится главным образом на основании «газовой модели», т. е. почти везде предполагается, что электроны проводимости представляют собой идеальный газ заряженных квазичастиц. Такое изложение кроме простоты оправдывается еще тем, что в большинстве случаев результаты, полученные из модели ферми-жидкости², совпадают с результатами, найденными в «газовом приближении». Во всех случаях, когда имеется расхождение между моделями, это специально оговаривается. Следует, правда, иметь в виду, что понятие «электрон проводимости», как элементарное возбуждение с определенным квазиимпульсом и энергией, имеет смысл только для возбуждений с энергией порядка фермиевской². Строго говоря, элементарным возбуждением электронной системы металла следует считать элементарное (имеющее определенный квазиимпульс p) возбуждение над основным состоянием металла, которое описывается фермиевской ступенькой.

*) Публикуемый обзор является второй частью статьи; первую часть см. УФН 69(3), 419 (1959).

Мы в процессе рассуждений будем часто пользоваться понятием «электрон проводимости» и для возбуждений, энергия которых не близка к энергии Ферми. Однако подавляющее число окончательных результатов, содержащихся в обзоре, определяется электронами с энергией порядка энергии Ферми, что делает эти результаты достоверными.

Авторы не ставили своей целью охватить все работы, вышедшие за последнее время, поэтому цитируемая литература не является библиографией по данному вопросу.

За три года, прошедшие после выхода первой части обзора, появился ряд работ по механике (классической и квантовой) электрона со сложным законом дисперсии. Их изложению посвящено приложение.

§ 1. ЭНЕРГИЯ ФЕРМИ. ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ. ЧИСЛО ЭЛЕКТРОНОВ

Изучение термодинамики электронного газа следует начать с его свойств в основном состоянии, т. е. при нуле температуры.

Очень важным для понимания свойств твердого тела вообще, и металла в частности, является представление о зонном характере электронного энергетического спектра: в твердом теле области допустимых значений энергии электронов (энергетические полосы или зоны) разделены областями запрещенных значений. Состояние электрона в зоне (номер которой будем обозначать через s) характеризуется проекцией спина на какую-либо ось ($\sigma = \pm 1/2$) и квазиимпульсом \mathbf{p} , причем состояния, отличающиеся по квазиимпульсу на величину $2\pi\hbar\mathbf{b}$, где \mathbf{b} — любой вектор обратной решетки, физически эквивалентны. Следовательно, энергия электрона зависит от дискретных параметров: номера зоны s и проекции спина σ , а также от непрерывного векторного параметра — квазиимпульса \mathbf{p} :

$$\varepsilon = \varepsilon_s^\sigma(\mathbf{p}). \quad (1.1)$$

Зонный характер энергетического спектра — следствие периодической зависимости энергии от квазиимпульса \mathbf{p} : при фиксированных s, σ и при изменении \mathbf{p} в пределах одного периода (в пределах одной ячейки обратной решетки, умноженной на $2\pi\hbar$) энергия пробегает все значения, соответствующие s -й зоне*). Энергетические полосы могут перекрываться, однако их индивидуальность, вообще говоря, сохраняется, так как каждой зоне соответствует свой закон дисперсии (1.1).

Наличие зон, частично заполненных электронами при абсолютном нуле температуры, характерно для металлов (проводников). У диэлектриков (изоляторов) имеются либо целиком заполненные, либо пустые зоны.

Полное заполнение энергетической зоны соответствует однородному заполнению всего пространства квазиимпульсов (или, короче, \mathbf{p} -пространства). Так как в каждой ячейке фазового пространства может находиться не более двух электронов (с разными направлениями спинов), ясно, что в каждой зоне могут находиться не более $2\mathcal{N}$ электронов, где \mathcal{N} — число элементарных ячеек в кристалле. Если бы энергетические полосы не перекрывались, то все кристаллы, имеющие четное число электронов на элементарную ячейку, были бы диэлектриками, а нечетное — металлами. Перекрывание зон делает такую классификацию совершенно неверной и объясняет тот факт, что большинство элементов в кристаллическом состоянии металлы.

Как правило, в металлах имеется несколько частично заполненных зон. Они носят название *зоны проводимости*. Именно они ответ-

*) Мы здесь (и почти всегда в дальнейшем) не будем учитывать зависимость энергии электрона от проекции спина σ , считая каждое состояние электрона дважды вырожденным.

ственны за «металлические» свойства металлов, в частности за электропроводность. Электроны, однородно заполняющие p -пространство, принадлежащие глубинным зонам, практически не принимают участия в тепловом движении *), так как для их возбуждения (т. е. для перехода в зоны проводимости) нужны энергии порядка нескольких эв. Поэтому одной из наиболее существенных характеристик металла является число электронов в частично заполненных зонах (N), которое, как ясно из предыдущего, должно весьма слабо зависеть от температуры. Кроме того, полное число электронов в незаполненных зонах, по-видимому, должно быть равно целому числу, умноженному на число атомов в кристалле.

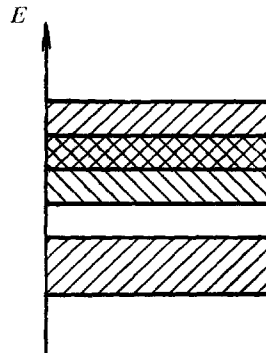


Рис. 1. Пересечение энергетических полос. Заптрихованы области разрешенных значений энергий.

Вся электронная система обладает единым химическим потенциалом ζ , который при нуле температуры определяет уровень заполнения энергетических зон электронами (рис. 1). Часто химический потенциал отсчитывают от дна соответствующей зоны. В этом случае, естественно, каждая зона обладает своим химическим потенциалом $\zeta_i = \zeta - \epsilon_{0i}$, где ϵ_{0i} — энергия, соответствующая дну зоны. Энергия, ниже которой все электронные состояния при $T = 0$ заняты, носит название г р а н и ч н о й э н е р г и и Ф е р м и (ϵ_F), а соответствующая ей изоэнергетическая поверхность — п о в е р х н о с т и Ф е р м и. В случае газа свободных электронов поверхность Ферми — сфера, радиус которой p_F определяется плотностью электронов:

$$p_F = 2\pi\hbar \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3}. \quad (1,2)$$

В случае диэлектриков граничная энергия Ферми совпадает с границей одной из энергетических полос. Поверхность Ферми при этом вырождается в точку.

В металле граничная энергия Ферми расположена в одной из энергетических зон. Поверхность Ферми — сложная периодическая поверхность, которая, по-видимому, у большинства металлов непрерывным образом проходит через всю обратную решетку (открытая поверхность по терминологии статьи¹).

Если поверхность Ферми замкнута, то она, очевидно, периодически повторяется в каждой ячейке p -пространства. Поскольку электроны занимают только те области p -пространства, где $\epsilon < \epsilon_F$, число электронов проводимости n на одну элементарную ячейку **) равно

$$n = \frac{2}{\Delta} \Delta_F, \quad \Delta_F = \int_{(\Delta)} E(\epsilon - \epsilon_F) d\tau_p, \quad d\tau_p = dp_x dp_y dp_z. \quad (1,3)$$

Здесь интегрирование ведется по объему Δ элементарной ячейки в p -пространстве, а

$$E(x) = \begin{cases} 1, & x < 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases} \quad (1,4)$$

*) Точнее, они движутся вместе с решеткой.

**) Очевидно, что плотность электронов $\frac{N}{V} = \frac{\Delta}{(2\pi\hbar)^3} n = \frac{2\Delta_F}{(2\pi\hbar)^3}$.

Если поверхность Ферми замкнутая, то Δ_F — объем, заключенный внутри поверхности Ферми. Заметим, что эта поверхность может распадаться на несколько полостей, расположенных в одной ячейке.

В тех случаях, когда в металле несколько частично заполненных зон, поверхность Ферми распадается на несколько поверхностей (по числу незаполненных зон), причем характер пересечения этих поверхностей, если они пересекаются, строго определен принципом непересекаемости термов ⁴ (см. ниже). При этом величина Δ_F^s для каждой из этих поверх-

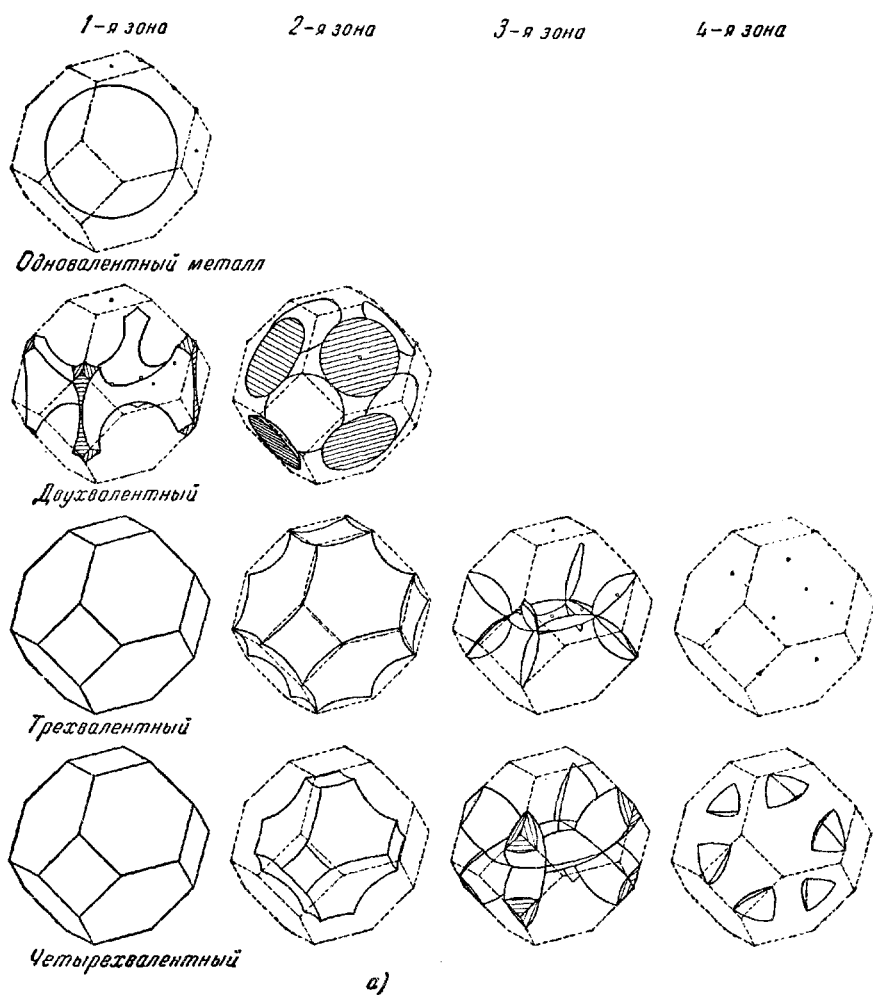


Рис. 2. Поверхности Ферми
а) с гранецентрированной кубической решеткой;

ностей определяет число электронов на элементарную ячейку в соответствующей зоне

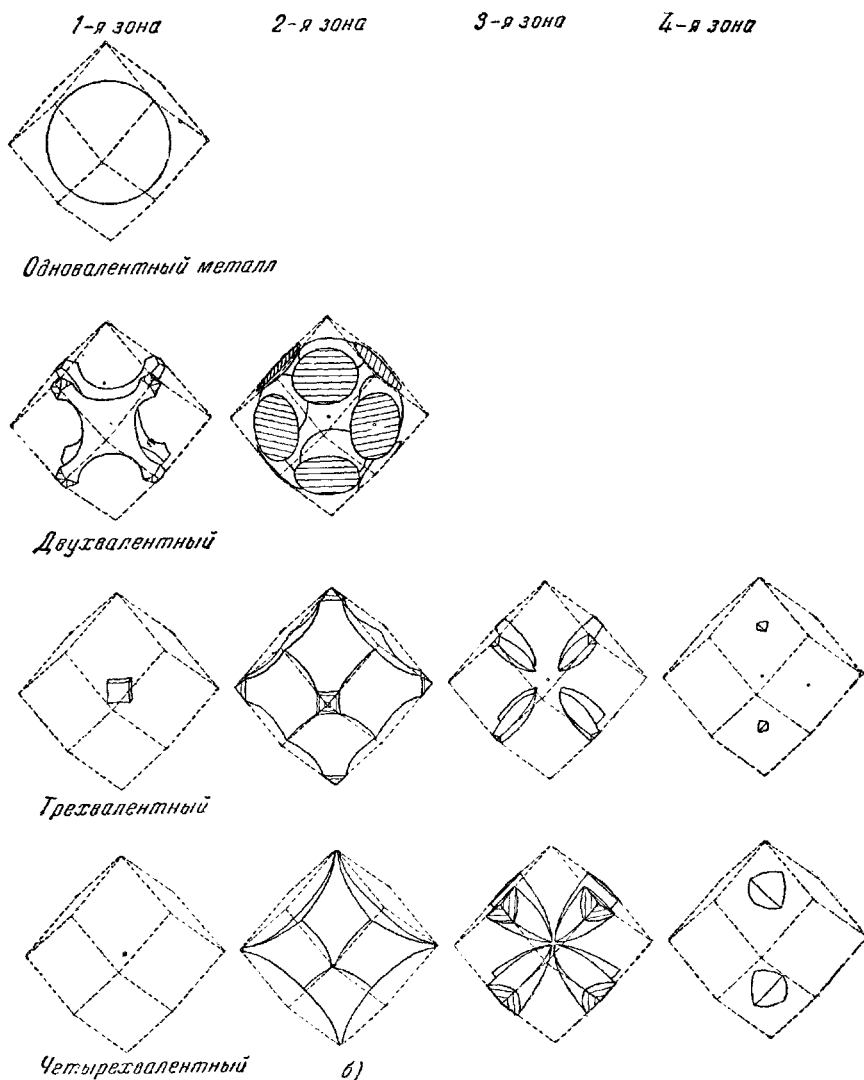
$$\frac{2\Delta_F^s}{\Delta} = n_s. \quad (1,5)$$

Естественно, что

$$\sum n_s = n. \quad (1,6)$$

Отметим сразу, что величина n_s может зависеть от температуры, так как при повышении температуры происходит перераспределение электронов между зонами.

Теоретическое вычисление формы поверхности Ферми всех металлов — в настоящее время задача неосуществимая. Поэтому наиболее естествен-



поливалентных металлов:

б) с объемноцентрированной кубической решеткой.

ным является определение формы поверхности Ферми по экспериментальным данным (см. § 9). Однако подобная задача не может быть решена без привлечения пробных моделей. При их построении используют чаще всего либо приближение почти свободных электронов (Гаррисон и др. ⁵), либо приближение связанных электронов, восходящее к Блоху ⁶. Наиболее существенным в этих двух методах является тщательный учет симметрии кристалла, дающий возможность разобраться в общих контурах

поверхности, а также найти точки обязательного вырождения, что позволяет определить структуру отщепившихся областей поверхности Ферми (см., например, ⁷).

Идеей первого метода (почти свободные электроны) является утверждение, что вся анизотропия поверхности Ферми — следствие периодичности кристалла: в нулевом приближении поверхности Ферми — совокупность пересекающихся сферических поверхностей, проведенных из эквивалентных точек в обратной решетке. Учет взаимодействия сводится к снятию вырождения в точках пересечения (рис. 2). Следует отметить, что полученные таким образом поверхности Ферми в ряде случаев неплохо согласуются с экспериментальными данными.

Другое приближение (приближение сильно связанных электронов) использует разложение энергии в ряд Фурье, а модельность метода связана с использованием не всего ряда, а лишь нескольких слагаемых, удовлетворяющих всем элементам симметрии кристалла. Возможные типы поверхностей Ферми ряда металлов (Ag, Au и др.) рассмотрены таким способом в работе Молинера ⁸ (см. также ⁹). Найденные таким путем поверхности Ферми удается согласовать с экспериментальными результатами (см., например, ¹⁰), и они в ряде случаев весьма похожи на поверхности, получающиеся из модели слабо связанных электронов. Близость результатов, полученных различными методами, объясняется, разумеется, тем, что оба метода правильно учитывают все элементы симметрии кристаллов.

Рассмотрим несколько подробнее те случаи, когда поверхность Ферми расположена вблизи особых точек в p -пространстве. Раньше всего следует остановиться на простом случае, когда поверхность Ферми расположена вблизи того значения $p = p_0$, где энергия в данной зоне имеет минимум $\varepsilon(p_0) = \varepsilon_0$. В этом случае поверхность Ферми — эллипсоид с полуосями $\sqrt{2m_1(\varepsilon_F - \varepsilon_0)}$, $\sqrt{2m_2(\varepsilon_F - \varepsilon_0)}$, $\sqrt{2m_3(\varepsilon_F - \varepsilon_0)}$, где m_1 , m_2 , m_3 — главные значения тензора эффективных масс $(\partial^2\varepsilon/\partial p_i \partial p_k)_{p=p_0}$. Из формулы (1,5) при этом легко находим

$$\varepsilon_F - \varepsilon_0 = \left(\frac{3N_s}{8\pi V} \right)^{2/3} \frac{(2\pi\hbar)^2}{2\sqrt{m_1 m_2 m_3}}. \quad (1,7)$$

Если поверхность Ферми расположена вблизи того значения $p = p_1$, где $\varepsilon(p)$ достигает максимума $\varepsilon(p_1) = \varepsilon_1$, то поверхность Ферми также является эллипсоид. Его полуоси — $\sqrt{2m'_1(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)}$, $\sqrt{2m'_2(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)}$, $\sqrt{2m'_3(\varepsilon_1 - \varepsilon_F)}$, где m'_1 , m'_2 , m'_3 — главные значения тензора эффективных масс, взятые с обратным знаком. Величину $\varepsilon_1 - \varepsilon_F$ часто связывают с числом свободных электронных состояний в данной зоне (N'_s):

$$\varepsilon_1 - \varepsilon_F = \left(\frac{3N'_{\pm s}}{8\pi V} \right)^{2/3} \frac{(2\pi\hbar)^2}{2\sqrt{m'_1 m'_2 m'_3}}. \quad (1,8)$$

Мы рассмотрели те случаи, когда вся поверхность Ферми в данной зоне — эллипсоид. Как видно из предыдущего, это имеет место, когда в данной зоне энергия Ферми ε_F близка либо к минимальному значению энергии в зоне ε_0 , либо к максимальному ε_1 .

Возможны случаи, когда только небольшая часть сложной поверхности Ферми — эллипсоид. Это возможно тогда, когда энергия Ферми ε близка к одному из тех критических значений энергии ε_k , при которых появляется новая отщепленная полость поверхности (рис. 3). Участок поверхности Ферми, который расположен вблизи точки $p = p_k$ — точки в которой возникает новая полость, — хорошо описывается уравнение

эллипсоида. Заметим, что число электронов внутри эллипсоида (если $\epsilon_F > \epsilon_k$) или число свободных состояний внутри эллипсоида (если $\epsilon_F < \epsilon_k$) связаны с величиной $\epsilon_F - \epsilon_k$ формулой (1,7) в первом случае и формулой (1,8) — во втором.

Особые точки другого типа — конические точки (рис. 4). Они расположены на тех изоэнергетических поверхностях, которые разграничивают поверхности разной топологии (в частности, такие поверхности могут отделять открытые поверхности от замкнутых, рис. 5). Значение энергии, при котором происходит изменение топологии изоэнергетических поверхностей, также назовем критическим и обозначим через ϵ_k . Если энергия Ферми ϵ_F близка к ϵ_k , то это означает, что на поверхности Ферми имеется область, на которой $p \approx p_k$ (p_k — коническая особая точка, см. рис. 4, 5). Вблизи этой точки закон дисперсии хорошо аппроксимируется уравнением двухполостного гиперboloида.

Как мы увидим дальше (см. § 2), важная роль особых поверхностей объясняется тем, что на них имеются особые точки, в которых скорость электронов обращается в нуль.

Рассмотрим теперь весьма важный случай вырождения, т. е. тот случай, когда в некоторых точках p -пространства уравнение $\epsilon_s(p) = \epsilon$

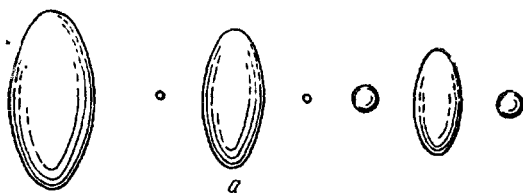


Рис. 3. Появление новой полости изоэнергетической поверхности.

Поверхность a соответствует критической энергии ϵ_k .

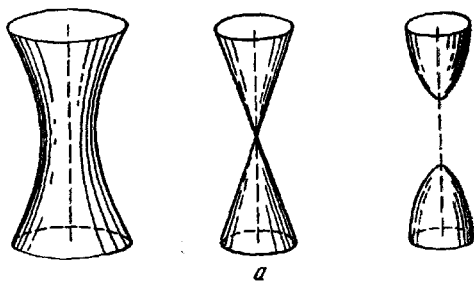


Рис. 4. Разрыв «перемычки» на изоэнергетической поверхности.

Поверхность a соответствует критической энергии ϵ_k . Она содержит коническую точку.

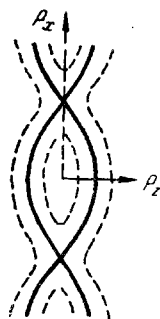


Рис. 5. Постепенный переход открытой поверхности типа «гофрированного цилиндра» в замкнутые полости.

имеет решение при нескольких s (пересечение изоэнергетических поверхностей). Подобная ситуация, как правило, является следствием симметрии кристалла ¹¹. Как видно из дальнейшего, пересечение изоэнергетических поверхностей, благодаря принципу непересекаемости термов ⁴, имеет весьма своеобразный характер. Произвольное пересечение запрещено совсем. Поверхности пересекаются в изолированных точках, причем так «подгоняются» друг к другу, что их (особенно в целях изучения динамики электронов) удобнее рассматривать как одну сложную самопересекающуюся поверхность.

Действительно, вблизи точки вырождения зависимость энергии от квазиимпульса дается следующим выражением *):

$$\varepsilon = A(\mathbf{p}) \pm \sqrt{B^2(\mathbf{p}) + C^2(\mathbf{p})}. \quad (1,9)$$

При определенной энергии ε точка вырождения (точка пересечения поверхностей \mathbf{p}_k) определяется тремя уравнениями

$$B(\mathbf{p}) = 0, \quad C(\mathbf{p}) = 0, \quad A(\mathbf{p}) = \varepsilon, \quad (1,10)$$

откуда ясно, что в общем случае точка вырождения является конической особой точкой самопересекающейся поверхности.

Заметим, что каждому значению ε соответствует определенное значение $\mathbf{p}_k = \mathbf{p}_k(\varepsilon)$.

Пересечение двух изоэнергетических поверхностей по линии или пересечение больше двух изоэнергетических поверхностей является следствием специальных свойств симметрии того или иного кристалла (например, почему-либо одна из величин, B или C , тождественно равна нулю).

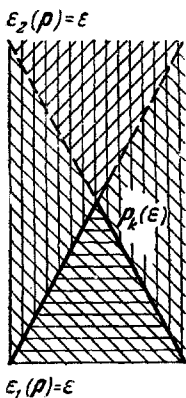


Рис. 6. Окрестность точки вырождения.

Обозначения: Ξ — область \mathbf{p} -пространства, где $\varepsilon_1(\mathbf{p}) < \varepsilon$; $|||$ $\varepsilon_1(\mathbf{p}) > \varepsilon$; $////$ $\varepsilon_2(\mathbf{p}) > \varepsilon$; $\\\\\\$ $\varepsilon_2(\mathbf{p}) < \varepsilon$.

На рис. 6 изображена окрестность точки пересечения, причем показано, где энергия больше ε , где меньше — для каждой из ветвей выражения (1,9), т. е. для каждой из зон. Из этого рисунка, на котором воспроизведены результаты анализа выражения (1,9), видно, что если $\varepsilon = \varepsilon_F$, то часть \mathbf{p} -пространства заполняется кратным образом **).

Если совпадение граничной энергии Ферми ε_F с тем изолированным значением энергии ε_k , при котором происходит изменение топологии изоэнергетической поверхности, следует считать случайным (см., правда, § 4), то при пересечении изоэнергетических поверхностей, принадлежащих разным зонам, весьма вероятно, что поверхность Ферми является поверхностью рассмотренного выше типа. Это объясняется тем, что пересечение изоэнергетических поверхностей, как правило, происходит при значениях энергии, заполняющих некоторый конечный интервал.

Для примера на рис. 7 схематически изображены самопересекающиеся изоэнергетические поверхности. Поверхности a и b — предельные поверхности этого семейства. Энергии, отвечающие этим поверхностям, соответствуют максимальному ε_m (или минимальному ε_m) значению энергии в зоне. Может показаться удивительным, что поверхности, принадлежащие разным энергиям, пересекаются. Легко, однако, видеть, что пересекаются поверхности, отвечающие разным зонам. Таким образом, электрон, имеющий квазиимпульс \mathbf{p}' (рис. 7) имеет энергию либо ε , либо ε' в зависимости от того, какой зоне он принадлежит (т. е. его энергия либо $\varepsilon_s(\mathbf{p}') = \varepsilon$, либо $\varepsilon_s(\mathbf{p}') = \varepsilon'$). Как показывает теоретическое рассмотрение, а также совокупность экспериментальных данных, поверхность Ферми графита — поверхность рассмотренного вида ¹² (рис. 8).

Заметим еще, что формула (1,5), связывающая объем, заключенный внутри поверхности Ферми Δ_F , с числом электронов в зоне n_s , не требует

*) См., например, формулу (76,4) из ⁴. Роль параметра, от которого зависит энергия, играет квазиимпульс \mathbf{p} .

**) Напомним, что электроны, однородно заполняющие \mathbf{p} -пространство (электроны заполненных зон) нами не учитываются вовсе.

какого-либо обобщения на случай пересечения изоэнергетических поверхностей.

Вырождение — весьма часто — следствие симметрии кристалла. Оно обычно имеет место на определенных, избранных линиях в p -пространстве (например, по главной оси в случае графита). Избранный характер этих значений квазиимпульса приводит к тому, что на них, как правило, энергия достигает своего минимального (либо максимального) значения.

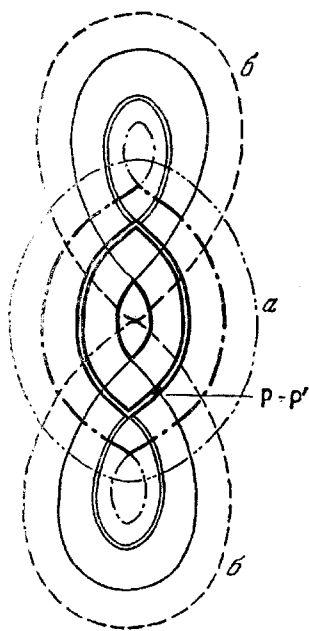


Рис. 7. Семейство изоэнергетических поверхностей, содержащих две точки вырождения. Обозначения: $\equiv \varepsilon_1(p) = \varepsilon, \varepsilon_2(p) = \varepsilon; \text{---} \varepsilon_1(p) = \varepsilon' > \varepsilon; \text{---} \varepsilon_2(p) = \varepsilon' > \varepsilon; \text{---} \varepsilon_1(p) = \varepsilon_M; \text{---} \varepsilon_1(p) = \varepsilon'' < \varepsilon; \text{---} \varepsilon_2(p) = \varepsilon'' < \varepsilon; \text{---} \varepsilon_2(p) = \varepsilon_M; \varepsilon_M$ — максимальное значение энергии во второй зоне; ε_m — минимальное значение энергии в первой зоне.

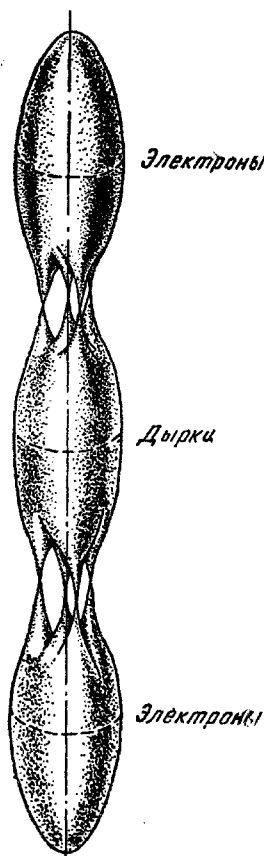


Рис. 8. Общий вид поверхности Ферми для графита¹².

Если две зоны имеют общий минимум, то, хотя они, естественно, имеют одинаковые граничные энергии, числа электронов в этих зонах, конечно, не совпадают (рис. 9).

Возможны случаи, когда минимум одной зоны совпадает с максимумом другой зоны. Если при этом нижняя зона полностью заполнена, а верхняя пуста, то такие зоны следует трактовать как зоны, у которых поверхность Ферми выродилась в точку. У твердых тел с таким электронным спектром должен наблюдаться ряд интересных свойств, сближающих их с полупроводниками.

У большинства металлов число электронов на элементарную ячейку близко к единице. Исключение представляют металлы пятой группы

периодической системы (Sb, As, Bi), у которых число электронов проводимости $\sim 10^{-5}$ на элементарную ячейку. Кристаллические решетки этих металлов одно-

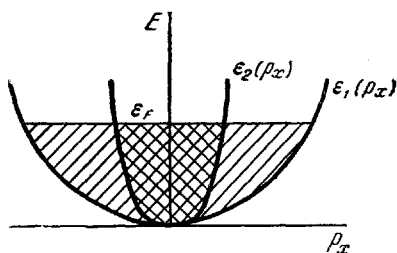


Рис. 9. Заполнение энергетических зон с общим минимумом. При общем уровне заполнения ($\varepsilon_1 \leq \varepsilon_F$, $\varepsilon_2 \leq \varepsilon_F$) числа электронов в зонах различны.

типы. Они относятся к ромбоэдрической системе с двумя атомами в ячейке, причем особенностью этих решеток является то, что они могут быть получены из простых кубических решеток с одним атомом на ячейку путем незначительного смещения атомов. Кристаллы с нечетным числом атомов на ячейку *) должны быть хорошими металлами. Однако изменение трансляционной симметрии, приводящее к удвоению объема ячейки, резко уменьшает число электронов в зоне проводимости и может даже в принципе перевести металл в ди-

электрик (см. рис. 10, на котором для примера рассмотрено удвоение периода в одномерном и двумерном случаях).

Если поверхность Ферми проходит достаточно близко от точки обязательного вырождения (в p -пространстве), то, как показано в работе

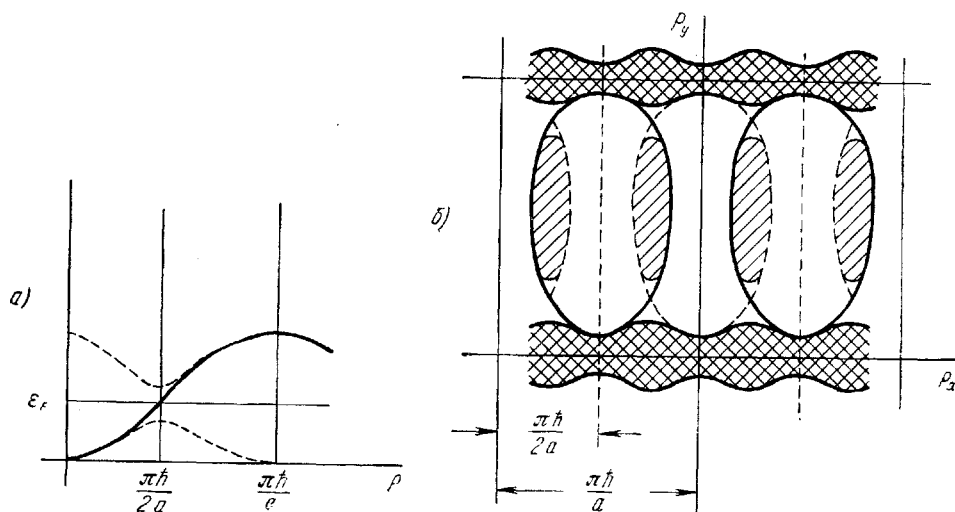


Рис. 10. Изменение электронного энергетического спектра в результате удвоения периода.

а) Одномерный случай: в результате удвоения периода «металл» с электронами, заполняющими половину зоны, превращается в диэлектрик; б) двумерный случай: в результате удвоения периода по оси x число электронов проводимости в «металле» с первоначально наполовину заполненной зоной резко уменьшилось. Появились малая электронная (ординарная штриховка) и малая дырочная (двойная штриховка) зоны.

А. А. Абрикосова и Л. А. Фальковского путем теоретико-групповых расчетов ¹³, при некоторых весьма общих условиях энергетически выгодно возникновение малых (но конечных) внутренних деформаций в кубической решетке, которые приводят к понижению ее симметрии и удвоению объема элементарной ячейки. По-видимому, нет необходимости искать каких-либо специальных физических оснований для объяснения того

*) Напомним, что As, Sb, Bi имеют нечетное число электронов на атом (цятая группа!).

факта, что поверхность Ферми проходит близко от точек обязательного вырождения (расположенных на границах зоны Бриллюэна), поскольку поверхность сферы с объемом, соответствующим числу электронов в элементарной ячейке, проходит весьма близко (численно) от границ бриллюэновской зоны. Так как модель слабой связи, как показал Гаррисон ⁵, дает хорошее приближение к экспериментально определенным формам поверхности Ферми у поливалентных металлов, весьма вероятно, что аргументация с помощью модели слабой связи достаточно убедительна.

При рассмотрении энергетической структуры основного состояния электронов в металле мы исходили из представления о существовании одночастичных возбуждений фермиевского типа (электронов проводимости). Как известно, подобное рассмотрение оправдывает себя для электронов с энергией, близкой к ϵ_F , так как время жизни элементарного возбуждения быстро уменьшается с возрастанием $|p - p_F|$, p_F — квазиимпульс на поверхности Ферми ³. Поэтому выражения, содержащие закон дисперсии «глубинных» электронов, т. е. электронов с энергией гораздо меньшей ϵ_F , носят несколько условный характер. Например, формулы (1,3) и (1,4) следует рассматривать как определение плотности числа электронов. Вывод о полном числе электронов в незаполненных зонах, по-видимому, не зависит от характера взаимодействия между электронами, так как основывается на соотношении неопределенности, а также на теореме о том, что число элементарных возбуждений фермиевского типа равно числу электронов (Л. Ландау ², Латтинджер ¹⁴).

§ 2. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ НА ЕДИНИЧНЫЙ ИНТЕРВАЛ ЭНЕРГИЙ

При построении термодинамики электронов проводимости необходимо знать плотность состояний электронов на единичный интервал энергий $\nu(\epsilon)$. Эта величина тесным образом связана с законом дисперсии.

Число состояний электронов в s -й зоне в элементе объема импульсного пространства равно

$$dn_p^{(s)} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} dp_x dp_y dp_z. \quad (2,1)$$

Так как состояние электрона полностью характеризуется его положением на изоэнергетической поверхности $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \epsilon$, а элемент объема $dp_x dp_y dp_z$ равен $ds d\epsilon/v_s$, где ds — элемент площади на изоэнергетической поверхности $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \epsilon$, а $v_s = |\nabla_{\mathbf{p}} \epsilon_s(\mathbf{p})|$ — модуль скорости электрона *), то, интегрируя выражение (2,1) по поверхности равной энергии, получим, что число электронных состояний $dn_\epsilon^{(s)}$ на интервал энергий $d\epsilon$ равно ($\epsilon_s(\mathbf{p}) = \epsilon$)

$$dn_\epsilon^{(s)} = \nu_s(\epsilon) d\epsilon, \quad (2,2)$$

где

$$\nu_s(\epsilon) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \oint \frac{ds}{v_s} \quad (2,3)$$

— плотность электронных состояний в s -й зоне на единичный

*) $|\nabla_{\mathbf{p}} \epsilon_s(\mathbf{p})|^{-1}$ — якобиан перехода от переменных p_x, p_y, p_z к переменным ξ, η, ϵ , где ξ, η — любая ортогональная система координат на поверхности $\epsilon_s(\mathbf{p}) = \epsilon$ ($ds = d\xi d\eta$).

интервал энергий. Вне зависимости от того, является изоэнергетическая поверхность замкнутой или открытой, интегрирование в формуле (2,3) ведется в пределах одной ячейки обратной решетки, причем в тех случаях, когда поверхность $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon$ распадается на несколько полостей, $\nu_s(\varepsilon)$, естественно, — сумма соответствующих интегралов.

Заметим, что $\nu_s(\varepsilon)$ — единственная характеристика электронного энергетического спектра, которая в «газовом» приближении (без учета взаимодействия между электронами) необходима для построения статистической термодинамики газа электронов проводимости в квазиклассическом приближении.

Так как $\frac{ds d\varepsilon}{v}$ — элемент объема, выражение (2,3) можно переписать следующим образом:

$$\nu_s(\varepsilon) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \left| \frac{d\Delta_\varepsilon^{(s)}}{d\varepsilon} \right|, \quad (2,4)$$

где

$$\Delta_\varepsilon^{(s)} = \int_{(\Delta)} E[\varepsilon_s(\mathbf{p}) - \varepsilon] d\tau_{\mathbf{p}}. \quad (2,5)$$

Функция $E(x)$ определена выражением (1,4).

Если поверхность $\varepsilon_s(\mathbf{p}) = \varepsilon$ — замкнутая, то $\Delta_\varepsilon^{(s)}$ — объем, заключенный внутри этой поверхности.

Величина $\frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \Delta_\varepsilon^{(s)}$ определяет число электронных состояний в s -й зоне с энергией, меньшей ε . Обозначим его через $N_s(\varepsilon)$. Тогда

$$\nu_s(\varepsilon) = \left| \frac{dN_s(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right|. \quad (2,6)$$

Вообще говоря, плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$ — сложная функция своего аргумента. Ее явный вид может быть получен только при специальных предположениях о законе дисперсии электронов проводимости.

В случае газа свободных электронов $\nu(\varepsilon)$ пропорциональна $\sqrt{\varepsilon}$:

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2} \frac{2}{h^3} V m^{3/2} \varepsilon^{1/2}. \quad (2,7)$$

Аналогичная зависимость плотности электронных состояний на единичный интервал энергий имеет место при энергиях, близких минимальному и максимальному значениям в зоне. Так как соответствующие изоэнергетические поверхности — эллипсоиды, вблизи минимума ($\varepsilon \gtrsim \varepsilon_0$)

$$\nu(\varepsilon) = \frac{V}{\pi^2} \frac{2}{h^3} V \sqrt{m_1 m_2 m_3} (\varepsilon - \varepsilon_0)^{1/2}, \quad (2,8)$$

а вблизи максимума ($\varepsilon \lesssim \varepsilon_1$)

$$\nu(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2} \frac{2}{h^3} V \sqrt{m_1' m_2' m_3'} (\varepsilon_1 - \varepsilon)^{1/2}. \quad (2,8')$$

Таким образом, в экстремальных точках (при $\varepsilon = \varepsilon_0$ и $\varepsilon = \varepsilon_1$) плотность электронных состояний имеет особенность типа $(\varepsilon - \varepsilon_k)^{1/2}$. Особенность такого типа характерна для всех тех значений энергии, при которых изменяется топология изоэнергетических поверхностей. С этой точки зрения минимум — это точка, в которой возникает новая полость изоэнергетической поверхности, а максимум — точка, в которой полость

исчезает. Появление или исчезновение полости может происходить и в середине зоны при определенных «критических» значениях энергии $\varepsilon = \varepsilon_k$ (см. рис. 3). Тогда при энергиях, близких к ε_k , плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$ можно представить следующим образом:

$$\nu(\varepsilon) = \nu_0(\varepsilon) + \delta\nu(\varepsilon), \quad (2,9)$$

где $\nu_0(\varepsilon)$ — плавная функция энергии, а $\delta\nu(\varepsilon)$ отлична от нуля с той стороны от критического значения, где число полостей больше на единицу. Пусть для определенности число полостей увеличивается с ростом энергии. Тогда

$$\delta\nu(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & (\varepsilon < \varepsilon_k), \\ \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{V}{h^3} \sqrt{m_1 m_2 m_3} (\varepsilon - \varepsilon_k)^{1/2} & (\varepsilon \geq \varepsilon_k). \end{cases} \quad (2,10)$$

Как указывалось в предыдущем параграфе, увеличение числа полостей изоэнергетической поверхности может происходить не только путем «рождения» новой полости (см. рис. 3), но и путем «разрыва» перемычек *) (см. рис. 4—5). Остановимся на этом случае изменения топологии несколько подробнее. Будем считать, что изоэнергетическая поверхность $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_k$ содержит коническую особую точку $\mathbf{p} = \mathbf{p}_k$. При энергиях, меньших ε_k , поверхность вблизи точки $\mathbf{p} = \mathbf{p}_k$ хорошо аппроксимируется уравнением двухполостного гиперболоида, а при $\varepsilon > \varepsilon_k$ — уравнением параболоида. При соответствующем выборе осей координат уравнение изоэнергетической поверхности вблизи $\mathbf{p} = \mathbf{p}_k$ ($\varepsilon \sim \varepsilon_k$) записывается следующим образом:

$$\varepsilon = \varepsilon_k + \frac{p_1^2}{2m_1} - \frac{p_2^2}{2m_2} - \frac{p_3^2}{2m_3} \quad (m_1, m_2, m_3 > 0). \quad (2,11)$$

Вычисляя объем, ограниченный поверхностью (2,11) и плоскостью $p_3 = \text{const}$ (ось p_3 соответствует оси перемычки), получаем

$$\Delta(\varepsilon, p_3) = \begin{cases} \frac{2\pi p_3^3}{3} \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{m_3} + 4\pi \sqrt{m_1 m_2} (\varepsilon - \varepsilon_k) p_3 & (\varepsilon > \varepsilon_k), \\ \frac{2\pi p_3^3}{3} \frac{\sqrt{m_1 m_2}}{m_3} + 4\pi \sqrt{m_1 m_2} (\varepsilon - \varepsilon_k) p_3 + \\ + \frac{8\pi}{3} \sqrt{2m_1 m_2 m_3} (\varepsilon_k - \varepsilon)^{3/2} & (\varepsilon < \varepsilon_k). \end{cases} \quad (2,12)$$

Отсюда видно, что и в этом случае плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon) \sim \frac{d\Delta}{d\varepsilon}$ можно представить в виде суммы двух слагаемых: плавного $\nu_0(\varepsilon)$ и нерегулярного, имеющего «корневую» особенность $\delta\nu(\varepsilon)$, отличного от нуля при тех энергиях, при которых число полостей больше (см. также примечание на этой странице).

Выражение (2,10) при этом остается в силе (смысл величин m_1, m_2, m_3 ясен из уравнения (2,11)).

Мы рассмотрели типичные особые точки, связанные с изменением топологии изоэнергетических поверхностей. Может оказаться, что особая точка $\mathbf{p} = \mathbf{p}_k$, кроме того, является точкой вырождения. Тогда уравнения изоэнергетических поверхностей вблизи этой точки имеют более сложный вид, чем это предполагалось:

$$\varepsilon = \varepsilon_k + (\mathbf{p} - \mathbf{p}_k)^2 \varphi(\mathbf{p}),$$

*) Изменение топологии изоэнергетической поверхности может происходить и без изменения числа полостей (например, разрыв перемычки у тороидальной поверхности). В этих случаях в точке $\varepsilon = \varepsilon_k$ меняется связность поверхности, причем $\delta\nu(\varepsilon) \neq 0$ в той области энергий, где связность меньше.

где $\varphi(\mathbf{n})$ — некоторая функция единичного вектора $\mathbf{n} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_k) / |\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|$, соответствующая симметрии точки $\mathbf{r} = \mathbf{r}_k$. Вывод о характере особенности при $\varepsilon = \varepsilon_k$ сохраняется полностью⁵⁰.

В предыдущем параграфе мы останавливались на случае пересечения изоэнергетических поверхностей. Заметим, что при тех энергиях, при которых происходит пересечение, плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$, конечно, никакими особенностями не обладает. Особыми, или критическими, являются и в этом случае те значения энергии, при которых

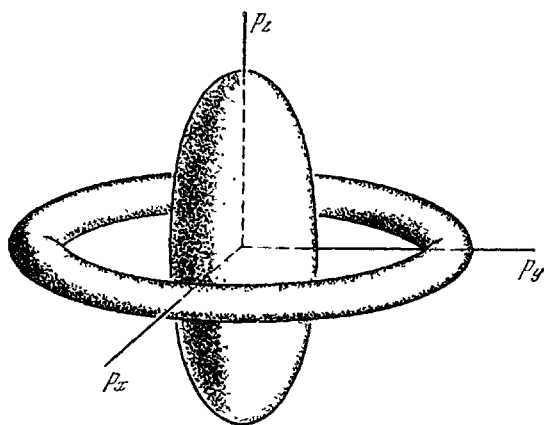


Рис. 11. Изоэнергетическая поверхность у кристаллов с петлей экстремумов согласно уравнению (2,13).

меняется топология изоэнергетических поверхностей. Например, поверхности a и b на рис. 7 являются в этом смысле особыми. Легко показать, что и в этих случаях $\delta\nu(\varepsilon) \sim \varepsilon - \varepsilon_k^{1/2}$ и отлично от нуля только по одну сторону от ε_k .

Рассмотренные здесь типы особых случаев (зарождение новой полости в точке и разрыв в точке-перемычке) исчерпывают все виды особых точек в \mathbf{p} -пространстве.

Однако возможны случаи, при которых в определенных приближениях экстремум достигается не в изолированных точках, а на целой кривой (петле экстремумов). Например, в случае кристаллов типа вюрцита петля экстремумов — окружность с центром на оси симметрии¹⁶. Аналогичная ситуация имеет место и в других кристаллах (CdS, InSb и др.).

Выясним, как выглядят в этих случаях плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$ при энергиях, близких к экстремальным.

Для определенности остановимся на кристаллах со структурой типа вюрцита. Согласно¹⁶ закон дисперсии электронов с энергиями, близкими к экстремальной, имеет вид

$$\varepsilon^{\pm}(\mathbf{p}) = A p_{\perp}^2 - B p_z^2 \pm a p_{\perp}. \quad (2,13)$$

Здесь $p_{\perp} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$, а ось z совпадает с осью симметрии кристалла. Изоэнергетические поверхности, соответствующие первой ветви (знак «+» в уравнении (2,13)), — овалонды с центром в начале координат, а соответствующие второй ветви (знак «-» в уравнении (2,13)), — торы с эллиптическими сечениями в любой плоскости, проходящей через ось симметрии (рис. 11). Вычисляя интересующие нас объемы и дифференцируя по энергии, получаем выражения для плотности электронных состояний: для первой ветви

$$\nu^{+}(\varepsilon) \sim \begin{cases} \varepsilon^{1/2}, & \varepsilon > 0, \\ 0, & \varepsilon < 0; \end{cases}$$

для второй ветви

$$\nu^{-}(\varepsilon) \sim \begin{cases} \frac{\pi a}{B A^{3/2}}, & \varepsilon > \varepsilon_k = \frac{a^2}{4A}, \\ 0, & \varepsilon < \varepsilon_k. \end{cases}$$

Отметим, что первая ветвь начинается с нулевой энергии, а вторая с энергии $\varepsilon = \varepsilon_k = \alpha^2/4A$. Таким образом, в этом случае в точке $\varepsilon = \varepsilon_k$ плотность электронных состояний испытывает конечный скачок. Величина скачка определяется параметром α , который связан со спинным взаимодействием электронов.

§ 3. ТЕРМОДИНАМИКА ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

Знание плотности электронных состояний позволяет построить термодинамику электронов проводимости.

Как было сказано выше, структура электронного энергетического спектра металла в несверхпроводящем состоянии такова, что заряженные элементарные возбуждения, которые мы называем электронами проводимости, представляют собой газ квазичастиц, подчиняющихся статистике Ферми — Дирака. Это означает, что равновесная функция распределения электронов $n_F(\varepsilon)$ — это функция Ферми

$$n_F(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon - \xi/T} + 1}, \quad (3,1)$$

где T — температура, измеренная в эргах, а ξ — химический потенциал определяемый условием нормировки

$$N = \sum_s \int \frac{v_s(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\varepsilon - \xi/T} + 1}. \quad (3,2)$$

Интегрирование можно распространить на все энергии, так как $v_s(\varepsilon) \neq 0$ только в пределах s -й энергетической зоны.

Построение термодинамики удобно начать с записи термодинамического потенциала

$$\Omega = -T \sum_s \int v_s(\varepsilon) \ln(e^{\varepsilon - \xi/T} + 1) d\varepsilon, \quad (3,3)$$

или, после интегрирования по частям,

$$\Omega = - \sum_s \int \frac{N_s(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\varepsilon - \xi/T} + 1}. \quad (3,4)$$

С другой стороны, полная энергия электронного газа равна

$$E = \sum_s \int \frac{\varepsilon v_s(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\varepsilon - \xi/T} + 1}. \quad (3,5)$$

Сравнение формул (3,4) и (3,5) показывает, что известное соотношение $PV = 2/3 E$, где P — давление (напомним, что $\Omega = -PV$), имеет место только для свободных электронов, для которых $v(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} \sim \varepsilon^{1/2}$ (см. (2,7)).

Так как $\Omega = -PV$, уравнения (3,2) и (3,4) можно рассматривать как параметрическое задание уравнения состояния газа электронов проводимости, причем параметром является химический потенциал ξ . Как видно из этих формул, уравнение состояния существенно зависит от плотности состояний $v(\varepsilon)$, т. е. по существу от закона дисперсии.

Рассмотрим теперь наиболее важный случай низких температур, т. е. будем считать, что во всех зонах (при любом s) электронный газ сильно вырожден.

Условие вырождения очень просто формулируется в случае газа свободных электронов ($T \ll \varepsilon_F$). В случае электронов проводимости — электронов со сложным законом дисперсии — условие вырождения означает, что

$$T \ll \min |\varepsilon_F - \varepsilon_k^{(*)}|, \quad (3.6)$$

где $\varepsilon_k^{(*)}$ — особые (критические, экстремальные) значения энергии.¹

Если условие (3,6) имеет место, то при вычислении интегралов, содержащих функцию Ферми $n_F(\varepsilon)$, можно пользоваться известным разложением по степеням температуры

$$\int_0^\zeta \varphi(\varepsilon) n_F(\varepsilon) d\varepsilon \cong \int_0^\zeta \varphi(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} T^2 \left(\frac{d\varphi}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\zeta} + \dots \quad (3.7)$$

Из выражений (3,4), (3,7) и (2,6) имеем

$$\Omega = \Omega_0 - \frac{\pi^2}{6} v(\zeta) T^2 + \dots, \quad v(\zeta) = \sum_s v_s(\zeta), \quad (3.8)$$

причем в последнем выражении суммирование, естественно, ведется по перекрывающимся, частично заполненным зонам. Ω_0 — значение термодинамического потенциала Ω при $T = 0$:

$$\Omega_0 = - \sum_s \int_0^\zeta N_s(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.8')$$

Рассматривая второй член в (3,8) как малую добавку к Ω_0 и выражая в нем ζ через плотность электронов с помощью нулевого приближения (т. е., попросту говоря, заменяя химический потенциал ζ граничной энергией ε_F , которая связана с плотностью электронов формулой (1,3)), мы можем записать для свободной энергии F

$$F = F_0 - \frac{\pi^2}{6} v(\varepsilon_F) T^2 + \dots, \quad F_0 = N\varepsilon_F - \sum_s \int_0^{\varepsilon_F} N_s(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.9)$$

Отсюда находим энтропию S_e и теплоемкость C_e газа электронов проводимости *)

$$S_e \simeq \frac{\pi^2}{6} v(\varepsilon_F) T, \quad C_e \simeq \frac{\pi^2}{6} v(\varepsilon_F) T. \quad (3.10)$$

Таким образом, электронная теплоемкость C_e при низких температурах (см. условие (3,6)) линейно зависит от температуры. Этот вывод не зависит от закона дисперсии электронов проводимости. Более того, формула (3,10) остается справедливой, даже если учесть взаимодействие между электронами в духе теории ферми-жидкости Ландау².

Из формул (3,8), (3,9) и (3,10) легко найти приближенные выражения для энергии E и для термодинамического потенциала Φ газа электронов проводимости:

$$E \simeq E_0 + \frac{\pi^2}{6} v(\varepsilon_F) T^2, \quad E_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon v(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.11)$$

$$\Phi \simeq \Phi_0 - \frac{\pi^2}{6} v(\varepsilon_F) T^2, \quad \Phi_0 = N\varepsilon_F. \quad (3.12)$$

*) При принятом здесь определении температуры (в эргах) теплоемкость — безразмерная величина.

Последнее выражение позволяет определить коэффициент температурного расширения α , равный $-\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P$:

$$\alpha \simeq \frac{\pi^2}{3} V^{-1} \frac{\partial}{\partial P} v(\epsilon_F) T. \quad (3,13)$$

Отметим, что формула (3,13) имеет не меньшую общность, чем формула (3,10). В частности, формула (3,13) имеет место и при учете взаимодействия электронов. Действительно, $\alpha \sim \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T \partial P} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial P \partial T} = \frac{\partial S}{\partial P}$, а энтропия электронов как величина, имеющая комбинаторный смысл, определяется систематикой состояний, не меняющейся при переходе от ферми-газа к ферми-жидкости.

У большинства металлов условие вырождения выполняется практически при всех температурах. Поэтому электроны проводимости вносят весьма малый вклад в термодинамические величины металла (в теплоемкость, во внутреннюю энергию и т. п.). Однако при низких температурах, когда внутренняя энергия колебательных степеней свободы быстро ($\sim T^4$) стремится к нулю, роль электронов проводимости резко возрастает. При температурах *) $T \ll \theta \sqrt{\theta/\epsilon_F}$, где θ — температура Дебая, электроны проводимости определяют термодинамические свойства металлов. В частности, это означает, что теплоемкость металла, а также его коэффициент теплового расширения линейно зависят от температуры в области достаточно низких температур. Этот факт хорошо известен как из экспериментальных, так и из теоретических исследований.

Постоянная γ в «зако́не» Грюнайзена (т. е. не зависящее от температуры отношение коэффициента температурного расширения α к теплоемкости C) для металлов в этой области температур определяется зависимостью плотности состояний электронов от давления **)

$$\gamma \simeq 2 \frac{\partial}{\partial P} \ln v(\epsilon_F). \quad (3,14)$$

Как видно из формулы (3,10), измерение теплоемкости металлов при низких температурах позволяет определить очень важную характеристику электронного энергетического спектра — плотность электронных состояний при энергии, равной фермиевской.

Теперь выясним температурную зависимость ряда термодинамических характеристик металлов, у которых поверхность Ферми расположена вблизи особых точек в p -пространстве.

Если поверхность Ферми расположена вблизи точки минимума (либо максимума) одной из перекрывающихся зон, то это означает, что в этой зоне число занятых состояний — число электронов (либо число свободных состояний — число «дырок») — мало. Хотя общий для всех зон химический потенциал ζ весьма слабо зависит от температуры, число электронов (либо «дырок») в рассматриваемой здесь аномально заполненной зоне от температуры зависит существенно. Действительно, из выражения (3,2), учитывая, что N от температуры не зависит, имеем

$$\zeta \simeq \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{v'(\epsilon_F)}{v(\epsilon_F)} T^2. \quad (3,15)$$

*) Мы считаем для оценки, что $v(\epsilon_F) \sim \frac{N}{\epsilon_F}$, а $N \sim \mathfrak{N}$.

**) При температурах $\theta \sqrt{\frac{\theta}{\epsilon_F}} \ll T \ll \theta$ постоянная Грюнайзена, естественно, определяется зависимостью от давления дебаевской температуры.

Число электронов в s -й зоне равно

$$N_s(T) = \int \frac{v_s(\epsilon) d\epsilon}{e^{\epsilon - \xi(T)/T} + 1}. \quad (3,16)$$

Обозначим через ϵ_{s0} минимальное значение энергии в s -й зоне, если зона почти пуста, и максимальное, если зона почти полностью заполнена. Аномалия заключается в том, что $|\epsilon_F - \epsilon_{s0}| \ll v(\epsilon_F)/v'(\epsilon_F)$ *).

Из (3,16), (3,15) и (3,7) имеем

$$N_s(T) \simeq \begin{cases} N_s(0) + \frac{\pi^2}{6} v_s(\epsilon_F) T^2 \frac{d}{d\epsilon_F} \ln \left[\frac{v_s(\epsilon_F)}{v(\epsilon_F)} \right] & (T \ll |\epsilon_F - \epsilon_{s0}|), \\ N_s(0) \frac{3(\sqrt{2}-1)}{4\sqrt{2}} \sqrt{\pi} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{T}{|\epsilon_F - \epsilon_{s0}|} \right)^{3/2} \left(\frac{v(\epsilon_F)}{v'(\epsilon_F)} \gg T \gg \right. \\ \left. \gg |\epsilon_F - \epsilon_{s0}| \right). & (3,17) \end{cases}$$

При получении последней формулы мы воспользовались тем, что согласно выражениям (2,8) и (2,8') $v_s(\epsilon) \sim |\epsilon - \epsilon_{s0}|^{1/2}$.

Знание зависимости числа электронов в аномальной зоне от температуры может оказаться существенным в тех случаях, когда свойства металла определяются электронами аномальных зон (например, диамагнетизм ряда металлов ¹⁷).

В первом параграфе мы говорили о гипотетических твердых телах, у которых поверхность Ферми — точка (в этих телах между полностью заполненной и пустой зонами нет энергетической щели). Термодинамические свойства электронов подобных тел определяются законом дисперсии вблизи точки соприкосновения зон. Например, если зависимость энергии от квазимпульса вблизи границы зон квазилинейна ($\epsilon \sim p$), то вклад электронов в теплоемкость металлов пропорционален T^3 , если же энергия квадратично зависит от квазимпульса ($\epsilon \sim p^2$), то $C_v \sim T^{3/2}$. Следует, однако, иметь в виду, что взаимодействие между электронами, как правило, снимает подобное вырождение, в результате чего между зонами возникает энергетическая щель, делая подобные тела обычными полупроводниками.

§ 4. ОБ АНОМАЛИЯХ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛА В ОБЛАСТИ БОЛЬШИХ ДАВЛЕНИЙ ¹⁸

Как мы уже говорили (§ 2), изменение топологии изоэнергетических поверхностей приводит к особенности плотности состояний $v(\epsilon)$. Вообще говоря, значения ϵ_k расположены достаточно далеко от граничной энергии Ферми ϵ_F и о наличии особых точек ϵ_k можно судить лишь по рентгеновским спектрам. Однако если существует какой-либо непрерывно меняющийся параметр, при изменении которого $\epsilon_F - \epsilon_k$ проходит через нуль, т. е. если можно изменить топологию граничной поверхности Ферми, то особенности спектральной плотности $v(\epsilon)$ и динамики электронов вблизи «критической» поверхности приводят к своеобразным аномалиям термодинамических и кинетических характеристик электронного газа в металле.

Таким непрерывным параметром могут служить деформации решетки, в частности всестороннее сжатие при сильных давлениях. Известно, что

*) Величина $v(\epsilon_F)/v'(\epsilon_F)$ характеризует расстояние (по энергиям) между поверхностью Ферми и особыми изоэнергетическими поверхностями основных (не аномальных) зон.

при больших давлениях анизотропия большинства свойств уменьшается, и поэтому можно ожидать, например, что характерная для слоистых структур поверхность Ферми типа «гофрированного цилиндра» должна, постепенно деформируясь, переходить в замкнутую поверхность, даже при постоянстве полного числа электронов в зоне проводимости (рис. 12). Разумеется, возможны и другие изменения топологии поверхности Ферми. Следует подчеркнуть, что изменение топологии поверхности Ферми не связано с изменением симметрии решетки и поэтому не отвечает фазовому переходу второго рода.

С другой стороны, первоначальная решетка может перестать быть термодинамически устойчивой еще до подхода к «критической» поверхности Ферми, так что фазовый переход первого рода наступит раньше, чем проявятся аномалии, связанные с изменением топологии *). Однако вследствие малости времени электронной «подстройки» при деформировании металла по сравнению со временем перестройки решетки при фазовом переходе подобные аномалии могут наблюдаться и в кратковременном метастабильном состоянии; поэтому в дальнейшем вопрос о стабильности или метастабильности состояния вблизи точки изменения топологии поверхности Ферми может не рассматриваться.

Другой параметр — концентрация примеси или компонент в сплаве, — казалось бы, сильнее меняет химический потенциал ζ и поверхность Ферми; однако для неупорядоченной решетки само понятие поверхности Ферми теряет точный смысл в связи с отсутствием трансляционной симметрии; поэтому особенность $\chi(\varepsilon)$ размывается и фактически отсутствует.

Ниже мы исследуем, какими свойствами обладает металл вблизи «электронного перехода», вызванного изменением топологии поверхности Ферми.

Если химический потенциал ζ близок к ε_h , то в соответствии с формулами (3,4) и (2,9) термодинамический потенциал Ω будет иметь следующий вид:

$$\Omega(\zeta, T) = \Omega_0(\zeta, T) + \delta\Omega, \quad (4,1)$$

где

$$\delta\Omega = - \int_0^{\infty} \frac{\delta N(\varepsilon) d\varepsilon}{e^{\varepsilon - \zeta/T} + 1}, \quad (4,2)$$

а

$$\delta N = \begin{cases} 0 & (\varepsilon < \varepsilon_h), \\ \frac{2}{3} \alpha (\varepsilon - \varepsilon_h)^{3/2} & (\varepsilon > \varepsilon_h). \end{cases} \quad (4,3)$$

*) Такой случай, в частности, по-видимому, имеет место в так называемых изоморфных переходах, где скачком меняются параметры решетки при одном и том же типе структуры.

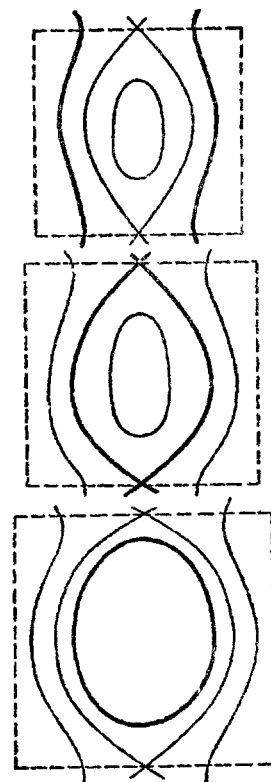


Рис. 12. Постепенный переход открытой поверхности Ферми (выделенной жирной линией на рисунке) в замкнутую. Следует обратить внимание на то, что с увеличением давления ячейки обратной решетки несколько возрастают

Значение параметра α ясно из формул (2,10) и (2,6). Напомним: для определенности мы считаем, что новая полость возникает при $\varepsilon > \varepsilon_k$. Полагая $\varepsilon - \varepsilon_k = x$ и $\zeta - \varepsilon_k = z$, получим, что при низких температурах ($T \ll z$) вблизи точки $z = 0$ изменение термодинамического потенциала Ω может быть представлено следующим образом:

$$\delta\Omega = \begin{cases} -\frac{\pi}{2} \alpha T^{5/2} e^{-z/T}, & \text{(I)} \\ -\frac{4}{15} \alpha |z|^{5/2} - \frac{\pi^2}{6} \alpha T^2 |z|^{3/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (4.4)$$

Переход из области (I) в область (II) соответствует появлению новой полости у поверхности $\varepsilon(p) = \zeta$ (или уменьшению ее связности).

Обе формулы (4,4) справедливы при $T \ll |z|$. При абсолютном нуле температуры ($T = 0$)

$$\delta\Omega = \begin{cases} 0, & \text{(I)} \\ -\frac{4}{15} \alpha |z|^{5/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (4.5)$$

Это означает, что вторые производные Ω в точке $z = 0$, являющейся точкой «электронного перехода», имеют вертикальный излом, а третьи обращаются в бесконечность как $z^{-1/2}$.

Так как число электронов в зоне проводимости постоянно, для определения аномалий термодинамических величин удобно пользоваться не потенциалом Ω , а свободной энергией $F = F(T, V, N)$. При этом объемом V является параметром, связанным с приложенным давлением; критическая энергия ε_k является непосредственной функцией объема $\varepsilon = \varepsilon(V)$, а химический потенциал ζ — также функцией V в силу постоянства числа частиц *):

$$N(\zeta, V) = N. \quad (4.6)$$

Обозначим через V_k тот объем, при котором происходит изменение топологии поверхности Ферми, т. е.

$$\zeta(V_k) = \varepsilon_k(V_k). \quad (4.7)$$

Согласно (4,6) и (4,7) модуль величины z , который входит в формулы (4,4) и (4,5), можно выразить через $|V - V_k|$:

$$z = \gamma |V - V_k|, \quad \gamma = \left| v^{-1}(\varepsilon_k) \left\{ \frac{\partial N}{\partial V} - v(\varepsilon_k) \frac{d\varepsilon_k}{dV} \right\} \right|, \quad (4.8)$$

причем мы воспользовались тем, что $\partial N / \partial \zeta = v(\zeta)$

Записав свободную энергию F в форме

$$F = F_0 + \delta F,$$

где F_0 — плавная часть свободной энергии, построенная на плотности $v_0(\varepsilon)$, легко убедиться, что δF количественно равна переугулярной добавке $\delta\Omega$, выраженной в переменных V, T , т. е. δF задана формулами (4,4) и (4,5), в которых надо заменить $|z|$ по формуле (4,8):

$$\delta F = \begin{cases} -\frac{V\pi}{2} \alpha T^{5/2} e^{-z/T}, & \text{(I)} \\ -\frac{4}{15} \alpha |z|^{5/2} - \frac{\pi^2}{6} \alpha T^2 |z|^{3/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (T \ll z, |z| = \gamma |V - V_k|).$$

*) В случае нескольких перекрывающихся зон $N(\zeta, V)$ — полное число частиц во всех зонах.

Отсюда, при стремлении температуры к абсолютному нулю, получим

$$\delta \frac{C_e}{T} = -\delta \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} = \begin{cases} 0, & \text{(I)} \\ \frac{\pi^2}{3} \alpha |z|^{1/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (4,9)$$

$$\delta \frac{\partial P}{\partial V} = -\delta \frac{\partial^2 F}{\partial V^2} = \begin{cases} 0, & \text{(I)} \\ \alpha \gamma^2 |z|^{1/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (4,10)$$

$$\delta \left(\frac{\partial P}{\partial T} / T \right) = -\frac{1}{T} \delta \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} = \begin{cases} 0, & \text{(I)} \\ \frac{\pi^2}{3} \alpha \gamma |z|^{-1/2}, & \text{(II)} \end{cases} \quad (4,11)$$

Выражение (4,9) описывает аномалию электронной теплоемкости; выражение (4,10) — аномалию коэффициента электронной сжимаемости.

Полное давление в металле складывается из электронного давления и частично компенсирующего его давления решеточного «остова» металла. Поскольку, однако, решеточная часть сжимаемости $\partial P_l / \partial V$, вообще говоря, непрерывна в точке $z=0^*$, особенность полного коэффициента сжимаемости дается тем же уравнением.

Наконец, как видно из (4,11), наиболее резкой особенностью обладает термический коэффициент давления $\partial P / \partial T$. Учитывая, что при низких температурах основную роль играет электронная часть термического коэффициента давления, имеем для плавной части

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = AT, \quad A = \frac{\pi^2}{3} \frac{\partial v}{\partial V}.$$

Таким образом, в области аномалии

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} T \left\{ \frac{\partial v}{\partial V} \pm \frac{1}{2} \alpha \gamma z^{-1/2} \right\}, \quad \text{(II)} \quad (4,12)$$

причем знак плюс имеет место в том случае, когда $V - V_k > 0$ в области (II), а минус, когда $V_k - V > 0$ в (II). Такой же особенностью обладает и коэффициент теплового расширения $\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V / \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T$:

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P = \frac{\pi^2 T}{3 \kappa_0} \left\{ \frac{\partial v}{\partial V} \pm \frac{1}{2} \alpha \gamma |z|^{-1/2} \right\}, \quad \text{(II)} \quad (4,13)$$

$$\kappa_0 = - \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_{T=0}.$$

Отметим специально, что если с увеличением давления в точке $P=P_k$ появляется новая полость, то коэффициент теплового расширения вблизи $P=P_k$ ($V=V_k$) со стороны больших давлений отрицателен и неограниченно возрастает по модулю при $P \rightarrow P_k$ (рис. 13).

Для того чтобы во всех формулах ((4,9) — (4,11)) можно было рассматривать аномалии по шкале давлений, достаточно учесть, что $P - P_k = -\kappa_0 (V - V_k)$ и, следовательно,

$$|z| = |\gamma| |V - V_k| = \frac{|\gamma|}{\kappa_0} |P - P_k|. \quad (4,14)$$

При этом удобно оценить коэффициенты γ , γ/κ_0 и критическое давление P_k , выразив их через исходную разность энергий $z_0 = (\xi - \varepsilon_l)_{P=0}$ (при нулевом давлении), а также критическую деформацию $(V - V_k)/V_0$,

*) Может оказаться, что часть «решеточной» энергии связи, обусловленная электронами проводимости, имеет в точке $z=0$ особенность того же характера, что и Ω_c : это дало бы незначительную добавку к $\partial P / \partial V$, не меняющую качественно всех результатов.

при которой осуществляется переход

$$|z| = \frac{|z_0| P}{P_k} \frac{P_k}{P_k}, \quad P_k = \kappa_0 |V - V_k|, \quad \gamma = \frac{z_0}{|z_0|} \quad (4,15)$$

Разумеется, выражение (4,15) имеет лишь характер оценки, так как в большом интервале деформаций линейные соотношения между P и $V - V_k$

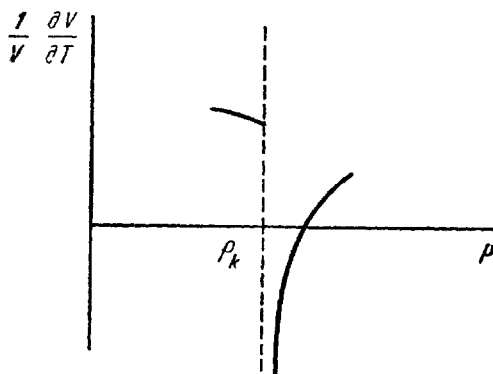


Рис. 13. Поведение коэффициента теплового расширения (при $T=0$) вблизи критического давления P_k , если при $P=P_k$ число полостей у поверхности Ферми увеличивается.

нарушаются. Если положить для критических деформаций $(V_0 - V_k)/V_0 \sim 0,05 : 0,1$, то $P_k \sim 5 \cdot 10^4 - 10^5$ кг/см² *).

Строго говоря, написанные формулы (4,9) — (4,11) справедливы при абсолютном нуле температуры. При конечных температурах особенности всех термодинамических величин размываются. Ширина температурного размытия аномалий $\Delta z \sim T$; в шкале давлений это дает

$$\frac{\Delta P}{P_k} \sim \frac{T}{|z_0|} = \frac{T}{\varepsilon_k |P_{=0}|} \quad (4,16)$$

Как следует из формулы (4,10), в области аномалии отрицательная величина $(\partial P / \partial V)_0 = -\kappa_0$ получает положительную добавку $\sim z^{1/2}$. Если в результате $P(V)$ перестает быть монотонной функцией

и на некотором участке $\partial P / \partial V$ оказывается положительной, то имеет место изоморфный фазовый переход первого рода со скачком объема. Записав разложение $\partial P / \partial V$ при малых положительных z и температуре, стремящейся к нулю:

$$\frac{\partial P}{\partial V} = -\kappa_0 + \alpha \gamma^2 z^{1/2} - \kappa_1 z,$$

убеждаемся, что область лабильности ($\partial P / \partial V > 0$) может иметь место при условии $\alpha \gamma^2 > 2\sqrt{\kappa_0 \kappa_1}$ и лежит справа от точки $z = 0$ в интервале

$$\alpha \gamma^2 - \sqrt{(\alpha \gamma^2)^2 - 4\kappa_0 \kappa_1} < 2\kappa_0 z < \alpha \gamma^2 - \sqrt{(\alpha \gamma^2)^2 - 4\kappa_0 \kappa_1}.$$

При этом сама точка электронного перехода $z = 0$ лежит в области метастабильности или стабильности.

Так как при конечной температуре особенность в точке $z = 0$ размывается, не следует называть электронный переход в точке $z = 0$ фазовым переходом; в связи с этим мы говорим все время об «аномалиях» в точке $z = 0$, хотя по терминологии Эренфеста можно было бы условно назвать такие аномалии при $T = 0$ «переходом $2^{1/2}$ рода», поскольку вторые производные от термодинамических потенциалов имеют особенность $\sim z^{1/2}$, а третьи — особенность $\sim z^{-1/2}$.

Во втором параграфе мы указывали, что возможны случаи, когда плотность электронных состояний при некоторой энергии $\varepsilon = \varepsilon_k$ терпит

*) Можно думать, что менее симметричные деформации (например, одностороннее сжатие или растяжение) сильнее меняют геометрию поверхности Ферми и требуют меньших напряжений. В частности, нарушение исходной симметрии кристалла при сколь угодно малых деформациях может привести к расщеплению поверхностей в точках обязательного самопересечения.

конечный скачок. Если благодаря всестороннему сжатию (или какой-либо другой деформации кристалла) граничная энергия Ферми совпадает с ϵ_k , то это должно проявиться в скачке электронной теплоемкости и других вторых производных от термодинамического потенциала. В этом, правда весьма специальном случае, электронная аномалия очень напоминает бы фазовый переход второго рода.

Электронные аномалии, обусловленные изменением топологии поверхности Ферми, должны проявляться в магнитных свойствах металла, причем особенно ярко в поведении его гальваномагнитных характеристик ¹⁸

§ 5. ПАРА- И ДИАМАГНЕТИЗМ (СЛАБЫЕ МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ)

Если поместить металл в магнитное поле, многие его свойства существенно изменяются. Так, например, в десятки, а иногда в сотни и тысячи раз увеличивается сопротивление чистых металлов при низких температурах в магнитных полях в несколько килоэрстед. Как правило, особенно существенное изменение претерпевают кинетические коэффициенты металлов (сопротивление, теплопроводность и др.). Однако и термодинамические равновесные характеристики металла также меняются под воздействием магнитного поля. В частности, все металлы в магнитном поле обладают магнитным моментом, который при низких температурах в больших полях сложным образом зависит от величины и направления магнитного поля.

Как известно ¹⁹, зависимость термодинамических величин от магнитного поля обусловлена квантованием энергии электронов и ядер. В отношении электронов это утверждение применимо и к электронам проводимости, электронам со сложным законом дисперсии. Действительно, при классическом рассмотрении учет магнитного поля соответствует переходу к кинетическим импульсам $\mathbf{p} = \mathbf{P} - e/c \mathbf{A}$ (обозначения те же, что в ¹). При вычислении термодинамических потенциалов интегрирование производится по всему \mathbf{P} -пространству. Делая замену переменных (переходя от \mathbf{P} к \mathbf{p}), убеждаемся, что термодинамические потенциалы вовсе не зависят от магнитного поля.

При квантовом рассмотрении зависимость от магнитного поля появляется по двум причинам. Во-первых, электроны и ядра имеют собственные (спиновые) магнитные моменты *), а во-вторых, орбитальное (пространственное) движение заряженных частиц в магнитном поле квантуется. Наличие собственных магнитных моментов является причиной парамагнетизма и близких к нему явлений, а квантование орбитального движения — диамагнетизма.

Основной величиной, подлежащей определению в настоящем параграфе, является магнитный момент металла. В магнитный момент металла вносят вклад не только электроны проводимости (т. е. не только электроны из частично заполненных энергетических полос). Если даже исключить ядра, вклад которых очень мал благодаря малости ядерных магнитных моментов, то остаются заполненные зоны, которые принимают участие в создании диамагнитного момента **). Диамагнитную восприимчивость электронов металла можно выразить в терминах закона дисперсии ²⁰, однако получающееся выражение крайне сложно и необозримо. Кроме того, как мы указывали во введении, само понятие закона дисперсии

*) Напомним, что наличие собственного магнитного момента — квантовый эффект. Его величина содержит постоянную Планка: $\mu_0 = eh/2m_0c$ (μ_0 — магнетон Бора, m_0 — масса свободного электрона).

**) Деление момента на парамагнитный и диамагнитный возможно только в слабых полях, когда момент линейно зависит от магнитного поля.

применимо, по-видимому, только вблизи поверхности Ферми. Поэтому, очевидно, нет основания придавать большое значение выражениям, которые зависят от свойств электронов с энергией, значительно меньшей, чем энергия Ферми.

Электроны в заполненных зонах имеют скомпенсированные спины *). Отсутствие свободных состояний вблизи занятых приводит к экспоненциальной зависимости от температуры парамагнитного момента, обусловленного электронами заполненных зон. Поэтому основную роль в парамагнетизме металла играют электроны проводимости (парамагнетизм Паули).

Как известно ²¹, парамагнитная восприимчивость (χ_n) слабо зависит от температуры и при низких температурах ($T \ll \epsilon_F$) определяется плотностью электронов на единичный интервал энергий при энергии, равной фермиевской:

$$\chi_n = \mu^2 \nu(\epsilon_F). \quad (5,1)$$

Эта формула выведена в «газовой модели» металла, т. е. без учета взаимодействия между электронами. Учет межэлектронного взаимодействия изменяет формулу (5,1) в том смысле, что коэффициент при $\nu(\epsilon_F)$ нельзя считать равным μ_0^2 . Поэтому кажется естественным не придавать значения сравнению «теоретической» формулы (5,1) с экспериментальными данными по парамагнитной восприимчивости металлов **).

Вопрос о сравнении результатов теории с экспериментальными данными парамагнитной восприимчивости осложняется еще тем, что диамагнитная и парамагнитная восприимчивости металлов одного порядка. Например, для газа свободных электронов диамагнитная восприимчивость составляет одну треть парамагнитной. Совпадение диамагнитной и парамагнитной восприимчивостей по порядку величины — непосредственное следствие вырождения электронного газа ($T \ll \epsilon_F$).

Как видно из формулы (5,1), парамагнитная восприимчивость металла пропорциональна плотности электронных состояний на единичный интервал энергий (при энергии $\epsilon = \epsilon_F$). Это означает, что спиновый парамагнетизм испытывает аномалию при изменении топологии поверхности Ферми под воздействием давления (см. § 4, а также ¹⁸). Выясним характер этой аномалии.

Во внешнем магнитном поле спиновый магнитный момент равен

$$M_\sigma = \frac{1}{2} \mu_{\text{эф}} \{N(\zeta + \mu H) - N(\zeta - \mu H)\},$$

где $N(\epsilon)$ — число электронов с энергией, меньшей ϵ (см. § 2). Отсюда парамагнитная восприимчивость χ_n вблизи аномалии имеет вид

$$\chi_n = \chi_n^{(0)} + \frac{1}{2} \mu_{\text{эф}}^2 \{\delta \nu(\zeta + \mu H) + \delta \nu(\zeta - \mu H)\},$$

*) Такая структура зон характерна для диамагнетиков. У парамагнетиков в заполненных зонах имеются электроны с нескомпенсированными спинами (аналогично тому, как у парамагнитных атомов имеются внутренние электроны с нескомпенсированными спинами). Обменное взаимодействие между спинами приводит, как правило, к их упорядочению, т. е. к появлению при достаточно низких температурах ферромагнетизма либо антиферромагнетизма.

**) Кроме того, надо иметь в виду, что у кристаллов с существенной спин-орбитальной связью структура парамагнитных уравнений может весьма значительно отличаться от структуры уровней свободного электрона²². В частности, состояние электрона в магнитном поле не характеризуется в этом случае определенной проекцией спина на магнитное поле.

где

$$\delta v(z) = \begin{cases} 0 & (z < 0), \\ \alpha z^{1/2} & (z > 0). \end{cases}$$

Значение параметра α ясно из формул (2,8). Таким образом, нерегулярная часть парамагнитной восприимчивости $\delta\chi_{\Pi}$ такова:

$$\delta\chi_{\Pi} = \begin{cases} 0, & z + \mu H < 0, \quad z - \mu H < 0; \\ \frac{1}{2} \alpha \mu_{\text{эф}}^2 (z + \mu H)^{1/2}, & z + \mu H > 0, \quad z - \mu H < 0; \\ \frac{1}{2} \alpha \mu_{\text{эф}}^2 (z - \mu H)^{1/2}, & z + \mu H < 0, \quad z - \mu H > 0; \\ \frac{1}{2} \alpha \mu_{\text{эф}}^2 \{ (z - \mu H)^{1/2} + (z + \mu H)^{1/2} \}, & z + \mu H > 0, \quad z - \mu H > 0. \end{cases}$$

Хотя действительная картина аномалии магнитной восприимчивости металла несколько осложняется наложением диамагнетизма, качественная картина, естественно, сохраняется. В частности, следует обратить внимание на резкую нерегулярную зависимость магнитной восприимчивости от магнитного поля вблизи критического давления. Правда, эта нерегулярность должна наблюдаться в весьма узком интервале давлений $\Delta p \sim (\mu H / \varepsilon_F) p_k$.

Зависимость $\delta\chi_{\Pi}$ от z и магнитного поля изображена на рис. 14.

Наличие особенности у магнитной восприимчивости при больших давлениях — не единственное проявление своеобразных черт электронного энергетического спектра в поведении металла в слабых полях.

Температурная зависимость магнитной восприимчивости ряда металлов (Bi, Sb и др.) может быть истолкована только на основании предположения о наличии в этих металлах зон, содержащих аномальное малое количество электронов проводимости¹⁷ (см. также конец § 3).

§ 6. ЭФФЕКТ ДЕ-ГААЗА—ВАН-АЛЬФЕНА (СИЛЬНЫЕ МАГНИТНЫЕ ПОЛЯ)

В предыдущем параграфе было показано, что описать магнитные свойства металлов только с помощью невзаимодействующих электронов проводимости нельзя. Однако, как мы уже говорили, большинство металлов обладает специфическими осцилляционными свойствами в больших полях ($\mu H \gg T$). Как мы увидим, за осцилляционные свойства несут ответственность электроны с энергией порядка энергии Ферми ($\varepsilon \sim \varepsilon_F$).

Наиболее хорошо изучен из осцилляционных эффектов эффект де-Гааза — ван-Альфена, т. е. сложная зависимость магнитного момента от магнитного поля, наблюдаемая при низких температурах и в сильных магнитных полях ($\mu H \gg T$).

Этот эффект обнаружен у большого числа металлов и, по-видимому, является специфически мегаллическим свойством, т. е. свойством, присущим всем металлам.

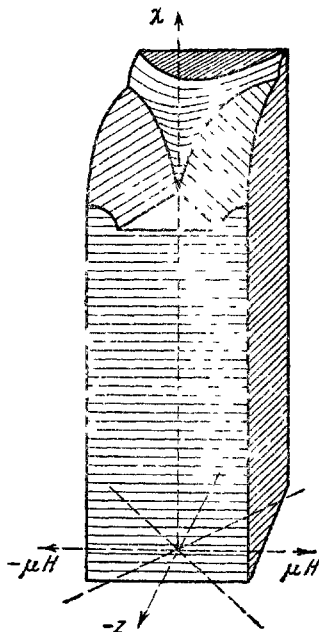


Рис. 14. Аномалия парамагнитной восприимчивости вблизи точки $p = p_k$.

Большинство осцилляционных свойств (эффект Шубникова — де Гааза и др.) имеет ту же природу, что и эффект де-Гааза — ван-Альфена (см. § 5 в работе ¹).

Все характеристики тела, находящегося в равновесии, могут быть вычислены, если известен его термодинамический потенциал. Поэтому основной задачей этого параграфа будет вычисление осциллирующей части термодинамического потенциала Ω электронов проводимости. Вычисление будет проведено в «газовом» приближении ²³. Ниже (в § 7) будет показано, что учет взаимодействия не меняет картины явления.

Согласно общим формулам статистической термодинамики

$$\Omega = -T \sum_{(s)} \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\xi - \varepsilon_s}{T} \right\}. \quad (6.1)$$

Суммирование производится по всем состояниям электрона *), по квантовому числу n (см. (5,6) из ¹), по двум проекциям спина σ ($\sigma = \pm 1$), по всем значениям z -й проекции квазимпульса p_z , а также по номерам частично заполненных зон. Так как p_z изменяется непрерывно, суммирование по p_z можно заменить интегрированием.

Число состояний dn_{p_z} на интервал $(p_z, p_z + dp_z)$ при фиксированных значениях остальных параметров (s, n, σ) легко вычислить, если заметить, что

$$dn_{p_z} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left\{ \int \int dp_x dp_y \right\} dp_z, \quad (6.2)$$

причем интегрирование надо производить по всем значениям p_x и p_y , расположенным между соседними классическими траекториями электрона в импульсном пространстве, т. е. между траекториями, отличающимися значениями n на единицу. Согласно формуле (5,6) из ¹ интересующая нас площадь равна $-eH\hbar/c$.

Поэтому

$$dn_{p_z} = -\frac{eHV}{(2\pi\hbar)^2 c} dp_z. \quad (6.3)$$

Использование формулы квазиклассического квантования не означает, что выражение (6,3) справедливо только в квазиклассическом приближении. Согласно (6,2) плотность состояний dn_{p_z}/dp_z определяется «площадью ячейки» в p_x, p_y -пространстве $\left(\int \int dp_x dp_y = \Delta p_x \Delta p_y \right)$, которая зависит только от условий коммутации операторов \hat{p}_x и \hat{p}_y . Используя выражение (6,19) из ¹, опять приходим к формуле (6,3).

Воспользовавшись значением плотности dn_{p_z}/dp_z , можно выражение (6,1) переписать следующим образом:

$$\Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \Phi(n), \quad (6.4)$$

где

$$\Phi(n) = \frac{VeHT}{(2\pi\hbar)^2 c} \sum_{\sigma, z=-\infty}^{\infty} \int \ln \left\{ 1 + \exp \frac{\xi - \varepsilon_{s\sigma}(p_z, n)}{T} \right\} dp_z. \quad (6.5)$$

*) Мы не оговариваем интегрирования по координатам, которое сводится к умножению на объем металла V .

Для дальнейшего удобно воспользоваться формулой Пуассона ²¹*)

$$\sum_{n_0}^{\infty} \chi(n) = \int_a^{\infty} \chi(n) dn + 2 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_a^{\infty} \chi(n) e^{2\pi i k n} dn. \quad (6.5a)$$

$\chi(n)$ — произвольная функция, a — число между $n_0 - 1$ и n_0 . В наших условиях $n_0 = 0$ и удобно положить $a = -1/2$.

Тогда из (6,4) и (6,5) имеем

$$\Omega = \int_{-1/2}^{\infty} \varphi(n) dn = 2 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-1/2}^{\infty} \varphi(n) e^{2\pi i k n} dn. \quad (6.6)$$

Дальнейшие вычисления можно производить, только зная зависимость энергии электрона от квантовых чисел. Будем считать, что ²²*)

$$\varepsilon_{\sigma}(p_z, n) = \varepsilon_n(p_z) + \sigma \mu_0 H \quad (\sigma = \pm 1), \quad (6.7)$$

а $\varepsilon_n(p_z)$ определены квазиклассическими условиями квантования ²³*) (см. (5,6) из ¹)

$$S(\varepsilon, p_z) = \frac{e\hbar H}{c} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.8)$$

Для простоты мы опустили везде индекс s .

Использование квазиклассических уровней энергии (6,7) оправдывается тем, что в осциллирующую часть термодинамического потенциала основной вклад вносят электроны с большими квантовыми числами n , если магнитное поле не слишком велико:

$$\frac{cS}{e\hbar H} \gg 1. \quad (6.9)$$

Это условие мы всегда будем предполагать выполненным.

Первое слагаемое в выражении (6,6) описывает монотонную зависимость термодинамического потенциала от магнитного поля. Осцилляторная зависимость содержится в остальных слагаемых, исследованием которых мы и займемся. При этом мы будем опускать все монотонные слагаемые. Для осциллирующей части Ω мы примем обозначение $\tilde{\Omega}$.

Согласно (6,5) и (6,6)

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega} &= \sum_{\sigma} \tilde{\Omega}_{\sigma}, \\ \tilde{\Omega}_{\sigma} &= 2 \operatorname{Re} \sum_{k=1}^{\infty} I_k, \end{aligned} \quad (6.10)$$

*) Формулу Пуассона легко получить, если учесть, что

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x}.$$

Это равенство является разложением периодической функции $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n)$ в ряд Фурье.

²²*) Напомним, что в случае существенной спин-орбитальной связи μ_0 может не совпадать с магнетоном Бора. В этом случае проекция спина на магнитное поле не является хорошим квантовым числом.

²³*) Как мы увидим дальше, главные осцилляционные члены могут быть вычлены, если даже пренебречь $1/2$ в условии (6,8). Отметим, однако, что условие (6,8) с учетом $1/2$ остается справедливым в случае произвольного закона дисперсии, а нарушается только вблизи траекторий с самопересечениями (см. примечание на стр. 439 в ¹, а также § 3 приложения).

где

$$I_k = \frac{V e H H}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \ln \left\{ 1 - \exp \left[\frac{\zeta_{\sigma} - \varepsilon_n(p_z)}{T} \right] \right\} e^{2\pi i k u}, \quad (6.11)$$

а

$$\zeta_{\sigma} = \zeta - \sigma \mu_0 H. \quad (6.12)$$

Выражение (6.11) можно преобразовать, если с помощью равенства (6.8) сначала перейти к интегрированию по энергиям (вместо интегрирования по n), а потом интегрирование по p_z заменить интегрированием по n , опять воспользовавшись равенством (6.8). В результате получим

$$I_k = \frac{2\pi V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{e^{\varepsilon - \zeta_{\sigma}/T} + 1} \int_0^{\varepsilon} d\varepsilon' \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} \int_{\left| \frac{\partial n}{\partial p_z} \right|} m^*(\varepsilon', n) e^{2\pi i k n} dn. \quad (6.12')$$

Знак суммы здесь означает суммирование по интервалам монотонного изменения функции $n(\varepsilon, p_z)$ при фиксированном ε .

Идея дальнейшего вычисления, т. е. выделения осцилляторной зависимости, связана с учетом того обстоятельства, что все величины, входящие в интеграл (6.12), кроме $(e^{\varepsilon - \zeta_{\sigma}/T} + 1)^{-1}$ и $e^{2\pi i k n}$, медленно меняются с изменением ε и n . При $\varepsilon \sim \zeta_{\sigma}$ величины n_{\min} и n_{\max} , как правило, значительно больше единицы*), т. е. $S_{\text{extr}} \sim c/ehH \gg 1$. Это, как указывалось в ¹, соответствует тому, что электрон с энергией, близкой к фермиевской, описывает площадь, значительно большую квадрата межатомного расстояния. Последнее условие соответствует условию применимости квазиклассического приближения.

Так как $n \gg 1$, можно воспользоваться методом перевала и показать, что основной вклад во внутренний интеграл дает интегрирование в окрестностях экстремальных точек $n_m(\varepsilon')$. После вычислений получим

$$I_k \approx \frac{V e H e^{-i\pi/2}}{2\pi c (2\pi\hbar)^2 k^{3/2}} \sum_m e^{\pm i\pi/4} \int_0^{\varepsilon} \frac{e^{2\pi i k n_m(\varepsilon')}}{e^{\varepsilon - \zeta_{\sigma}/T} + 1} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_{n_{z,m}}}}. \quad (6.13)$$

Суммирование ведется по всем экстремальным точкам функции $n(\varepsilon, p_z) = \frac{cS(\varepsilon, p_z)}{ehH}$ при фиксированном ε . Точки, в которых $n_m = 0$, не учитываются. Знак плюс в выражении $e^{\pm i\pi/4}$ стоит в том случае, когда экстремальная точка является минимумом, а знак минус, когда экстремальная точка является максимумом.

Теперь воспользуемся тем, что основной вклад в осциллирующую часть I_k дает интегрирование вблизи точки резкой нестационарности фермиевской функции, т. е. вблизи $\varepsilon = \zeta_{\sigma}$. Это позволяет последнее выражение записать следующим образом:

$$I_k \approx \frac{V e H e^{-i\pi/2}}{2\pi c (2\pi\hbar)^2 k^{3/2}} \sum_m e^{-2\pi i k n_m(\zeta_{\sigma}) \pm i\pi/4} \times \frac{1}{\sqrt{\left| \frac{\partial^2 n}{\partial p_z^2} \right|_{\varepsilon=\zeta_{\sigma}, p_z=p_z^m}}} \int_0^{\varepsilon} \frac{e^{2\pi i k (dn_m/d\varepsilon)\varepsilon - \zeta_{\sigma}(\varepsilon - \zeta_{\sigma})}}{e^{\varepsilon - \zeta_{\sigma}/T} + 1} d\varepsilon.$$

*) При каждом значении энергии есть $n_{\min} = 0$ (при том значении p_z , при котором секущая плоскость $p_z = \text{const}$ касается изоэнергетической поверхности). Эти точки нас не интересуют, так как интегрирование вблизи них не дает вклада в осциллирующую часть потенциала²³.

Вводя новую переменную интегрирования $x = \varepsilon - \xi_0/T$ и воспользовавшись тем, что $T \ll \xi_0$, распространим интегрирование от $-\infty$ до $+\infty$. После интегрирования, подставив найденное выражение в равенство (6,10), получим

$$\tilde{\Omega} \approx \frac{V}{2\pi^3 \sqrt{2\pi} h^3} \left(\frac{e\hbar H}{c} \right)^{5/2} \sum_n \left| \frac{\partial^2 S(\varepsilon, p_z)}{\partial \varepsilon \partial p_z} \right|_{\substack{\varepsilon=\xi_0 \\ p_z=\xi_0/m}}^{-1,2} (m^*(\xi, p_z^m))^{-1} \times \\ \times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\psi(k\lambda)}{k^{5/2}} \cos \left\{ k \left(\frac{cS_m}{e\hbar H} - \pi \pm \frac{\pi}{4} \right) \right\} \cos \left(\pi k \frac{m^*}{m_0} \right), \quad (6,14)$$

где

$$\psi(z) = \frac{z}{\operatorname{sh} z}, \quad \lambda = 2\pi^2 \frac{T}{\hbar \omega_H}, \quad \omega_H = \frac{eH}{m^*c}.$$

При получении формулы (6,14) мы воспользовались тем, что при суммировании по двум направлениям спина (см. (6,10)) везде, кроме аргумента косинуса, можно заменить ξ_0 на ξ , так как $\mu_0 H \ll \xi$. В аргументе косинуса нужно разложить $S_m(\xi_0)$ по степеням $\mu_0 H$, ограничившись первой степенью $\mu_0 H$. Учет небольшого изменения S_m здесь необходим, так как согласно условию $cS/e\hbar H > 1$ и небольшое изменение S_m приводит к большому изменению аргумента.

Полученная формула (6,14) описывает основной вклад в осциллирующую часть термодинамического потенциала, т. е. описывает осцилляции с наибольшей амплитудой. Анализ выражения (6,12) показывает, что осциллирующие добавки возникают благодаря особенностям $S(\varepsilon, p_z)$ или ее производным. Между тем при любой невыпуклой поверхности Ферми в широких интервалах направлений магнитного поля имеются особые сечения типа восьмерок, для которых $S(\xi, p_z)$ имеет особенность типа $\Delta p_z \ln \Delta p_z$, $\Delta p_z = p_z - p_{*k}$, p_{*k} — значение p_z , соответствующее особому сечению (см. § 3 из ¹, а также § 2—3 приложения). Интегрирование вблизи такого сечения дает конечный вклад в осциллирующую часть потенциала, причем согласно ²⁵ амплитуда осцилляционных членов, обусловленных «восьмерками», в $cS/e\hbar H$ раз меньше, чем амплитуда осцилляций, обусловленных экстремальными сечениями.

Так как $\psi(z)$ — монотонно убывающая функция порядка или меньше единицы ($\psi(z) = 1$ при $z = 0$ и $\psi(z) \approx 2ze^{-z}$ при $z \gg 1$), а $\partial^2 S / \partial p_z^2 \sim 1$, при не слишком высоких температурах порядок величины $\tilde{\Omega}$ определяется множителем $V/h^3 \cdot (e\hbar H/c)^{5/2} \cdot 1/m$. Монотонная часть термодинамического потенциала при не слишком больших полях ($\mu H \ll \varepsilon_F$) порядка

его классического значения ²³, т. е. порядка $(V/h^3) \int_0^{\xi} \tau(\varepsilon) d\varepsilon$ (см. формулу

(3,8')). Если поверхность Ферми не обладает аномальной большой анизотропией, то последнее выражение $\sim V/h^3 \cdot S^{5/2}/m$. Поэтому осциллирующая часть потенциала есть малая добавка $\sim (e\hbar H, cS)^{5/2}$ к его регулярному (по сути дела, классическому) значению. Отсюда следует, что осциллирующая часть свободной энергии \tilde{F} численно равна $\tilde{\Omega}$, если в формуле (6,14) выразить химический потенциал ξ через полное число электронов N и объем V , т. е. вместо ξ подставить энергию Ферми ε_F . Зависимость химического потенциала от магнитного поля, конечно, имеет место. Она должна приводить к осциллирующей зависимости тока термоэлектронной эмиссии ²⁶ (см. также § 8).

Таким образом, формулой (6,14) можно непосредственно пользоваться для вычисления интересующих нас наблюдаемых величин. Так,

осциллирующая часть z -й проекции момента *) есть $M_z = -\partial\tilde{\Omega}/\partial H$, а соответствующая часть теплоемкости равна $\tilde{C} = T \partial^2\tilde{\Omega}/\partial T^2$.

Формула (6,14) справедлива при произвольном соотношении между $\hbar\omega_H = e\hbar H/m^*c$ и температурой T . При ее получении мы предполагали только, что $T, \hbar\omega_H \ll \epsilon_I$.

При абсолютном нуле температуры ($T \ll \hbar\omega_H$) имеем

$$\tilde{\Omega} \approx \frac{1}{2\pi^3} \frac{1}{2\pi\hbar^3} \left(\frac{e\hbar H}{c} \right)^{5/2} \sum_m \frac{1}{m^*} \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|^{-1/2} \times \\ \times \sum_{k=1}^{\infty} k^{-5/2} \cos \left\{ k \left(\frac{eS_m}{e\hbar H} - \pi \right) + \frac{\pi}{4} \right\} \cos \left(\pi k \frac{m^*}{m_0} \right). \quad (6,15)$$

При сравнительно высокой температуре ($\lambda = 2\pi^2(T/\hbar\omega_H) \gg 1$) из всех слагаемых (при суммировании по k) надо оставить одно:

$$\tilde{\Omega} = \frac{V}{h^3} \sqrt{\frac{2}{\pi^3}} T \left(\frac{e\hbar H}{c} \right)^{3/2} \sum_m \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_m^{-1/2} e^{-2\pi^2 T / \hbar\omega_H} \times \\ \times \cos \left(\frac{eS_m}{e\hbar H} - \pi \pm \frac{\pi}{4} \right) \cos \left(\pi \frac{m^*}{m_0} \right). \quad (6,16)$$

Благодаря множителю $2\pi^2$ в условии применимости формулы (6,16) она справедлива даже при сравнительно низких температурах**) ($T \gg \hbar\omega_H/20$).

Согласно формулам (6,14)–(6,16) $\tilde{\Omega}$ – сложная осциллирующая функция магнитного поля, причем расстояния между нулями этой функции (ее «периоды») определяются экстремальными сечениями поверхности Ферми:

$$\delta \frac{1}{H} = \frac{2\pi e\hbar}{eS_m}. \quad (6,17)$$

Следует обратить внимание на то, что если откладывать $\tilde{\Omega}$ в зависимости от величины обратного поля $1/H$, то периоды не зависят от магнитного поля. Кроме того, $\delta(1/H)$ не зависит от температуры.

Если $\delta H \ll H$, то

$$\delta H = \frac{2\pi e\hbar}{eS_m} H^2, \quad (6,18)$$

т. е. в больших полях период пропорционален квадрату магнитного поля.

Температурная зависимость $\tilde{\Omega}$ определяется величиной эффективной массы $m^*(\epsilon_I, p_m)$. Однако надо иметь в виду, что взаимодействие электронов с примесями, с колебаниями решетки и другими нарушениями периодичности кристалла приводит к уменьшению амплитуды осцилляций***). Учет рассеяния электронов на примесях (Бычков ²⁷) показывает, что эффект уменьшения амплитуды осцилляций можно учесть, если температуру заменить эффективной температурой, равной $T \rightarrow 1/\tau$, где τ по порядку величины совпадает с временем свободного пробега электрона (качественно этот результат был получен Динглом ²⁸). Формулы Дингла и Быčkova.

) При вычислении x -й и y -й проекций магнитного момента надо при дифференцировании $\tilde{\Omega}$ учесть, что m^ и S_m зависят от направления магнитного поля.

**) При численных оценках надо помнить, что эффективная масса m^* может существенно отличаться от массы свободного электрона.

***). О межэлектронном взаимодействии см. следующий параграф

выведенные в предположении о квадратичном законе дисперсии электронов проводимости, удобны для оценки величины амплитуды *).

Получим теперь выражение для компоненты магнитного момента вдоль магнитного поля. Так как $cS_m/ehH \gg 1$, дифференцировать при

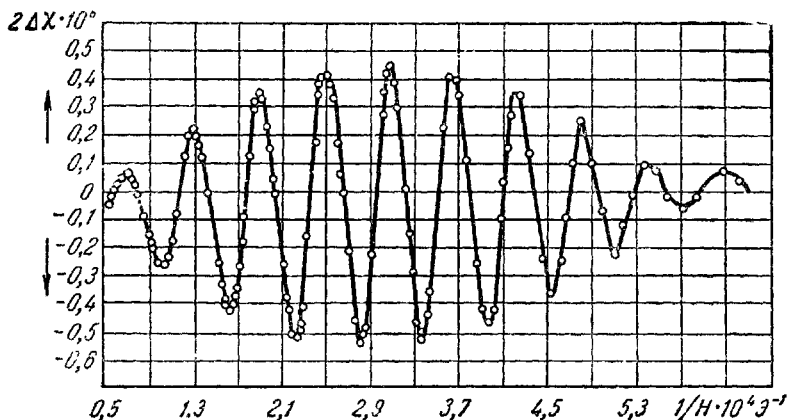


Рис. 15. Типичная кривая зависимости магнитной восприимчивости от обратного магнитного поля (Zn , $T=4,2$ °K¹⁸).

этом надо только косинус, а медленно меняющуюся амплитуду перед косинусом можно не дифференцировать:

$$\begin{aligned} \tilde{M}_z \approx & -\frac{V}{h^3} \frac{1}{2\pi^3 \sqrt{2\pi}} \left(\frac{eh}{c} \right)^{3/2} \sqrt{H} \sum_m \frac{S_m(\epsilon_F)}{m^* \left| \frac{\partial^2 S}{\partial p_z^2} \right|_m^{1/2}} \times \\ & \times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\psi(k\lambda)}{k^{3/2}} \sin \left[k \left(\frac{cS_m}{ehH} \right) - \pi \right] + \frac{\pi}{4} \cos \left(\pi k \frac{m^*}{m_0} \right). \end{aligned} \quad (6,19)$$

В сравнительно больших полях при низкой температуре, т. е. при $\psi \approx 1$, осциллирующая часть момента значительно больше его монотонной части. Действительно, можно показать, что $M \sim \frac{V}{h^3} \left(\frac{eh}{c} \right)^2 \frac{S^{1/2} H}{m^*}$, т. е.

$$\frac{\tilde{M}}{M} \sim \left(\frac{cS}{ehH} \right)^{1/2} \gg 1.$$

При оценке мы исходили из выражения для M , полученного в работе Лифшица и Косевича (см. формулу (П.2) в²²).

То что осциллирующая часть момента оказалась значительно больше его монотонной части, не должно удивлять, так как весь момент (и монотонная часть также!) имеет квантовомеханическое происхождение.

Сравнительно большая величина \tilde{M} облегчает наблюдение осцилляционных эффектов.

На рис. 15 приведены типичные кривые зависимости магнитного момента от магнитного поля. У большинства металлов зависимость магнитного момента от магнитного поля не ограничивается одной гармоникой, а представляет из себя суперпозицию нескольких гармоник, причем, как правило, с резко различными периодами (рис. 16). Это означает, что у большинства металлов поверхность Ферми очень сложна, причем

*) Следует отметить, что качественное рассмотрение (Дингла²⁴) не дает возможности полностью учесть роль столкновений в осцилляционных эффектах. В частности, величина $\partial M_z / \partial H$, вычисленная Бычковым²⁷, существенно отличается от величины $\partial M_z / \partial H$, найденной по формулам Дингла²⁸.

численные оценки показывают, что у всех металлов, кроме металлов первой группы, имеются сравнительно малые сечения, величина которых значительно меньше $(h/a)^2$, где a — постоянная решетки ($S_0 = 4\pi (3/8\pi)^{2/3} (2\pi\hbar)^2/a^2$ — максимальное сечение сферы Ферми для свободного электронного газа с плотностью, равной $1/a^3$). Обычно при расшифровке экспериментальных данных считается, что малые сечения соответствуют существованию отдельных малых полостей у поверхности Ферми *).

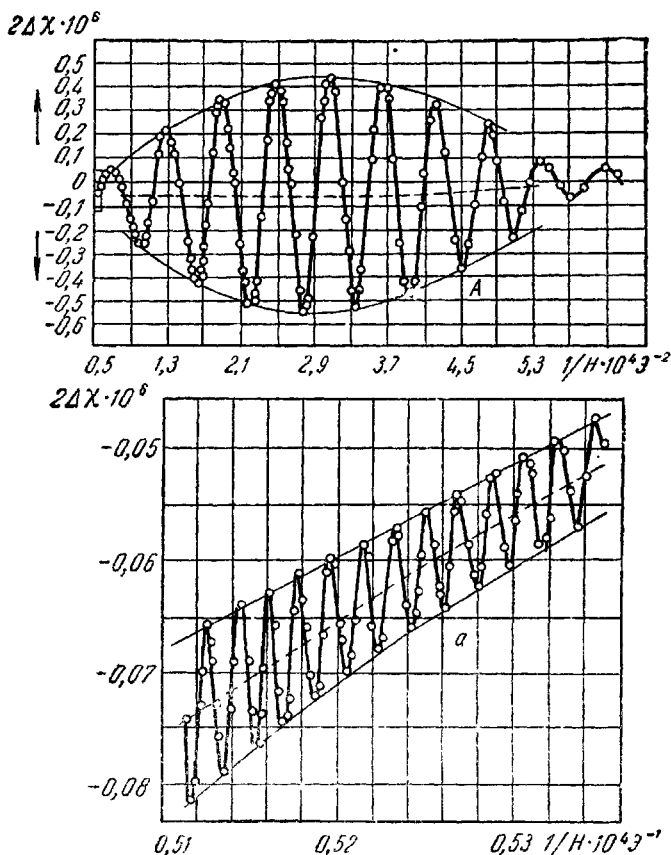


Рис. 16. Тонкая структура явления де-Гааза—ван-Альфена у кристалла Zn ($T = 4,2^\circ\text{K}$).

Кривая a представляет собой растянутый по обеим координатным осям участок основной кривой A , отложенный на рисунке в прямоугольнике.

Оценка объема таких полостей показывает, что в них может находиться $\sim 10^5$ электронов (или «дырок») на атом. Оценка амплитуды, т. е. множителя перед косинусом, приводит к весьма малым значениям эффективных масс электронов, расположенных на малых сечениях ($m^* \sim (10^{-3} \div 10^{-2}) m_0$, здесь m_0 — масса свободного электрона).

Большое число экстремальных сечений, т. е. большое число гармоник в зависимости магнитного момента от магнитного поля, очень затрудняет расшифровку экспериментальных кривых. Однако использование раз-

*) Согласно ²⁵ существование малых сечений может быть связано не только с отцепившимися областями, но и с небольшими выпуклостями и вмятинами на большой поверхности Ферми.

личных интервалов полей, а также тщательное измерение угловой зависимости периодов (см., например, рис. 17) позволило не только расшифровать кривые $\tilde{M}(H)$, но и по измеренным периодам определить форму поверхности Ферми ряда металлов (см. § 9).

Остановимся еще на одном явлении, получившем название «магнитного пробы»²⁹. При движении электрона по квазиклассической траектории обычно очень мала вероятность его перехода на близкую траекторию.

Однако если эти траектории близки, то в достаточно больших полях электрон, не «замечая» небольших потенциальных барьеров между траекториями, будет двигаться по «траектории», состоящей из элементов несколь-

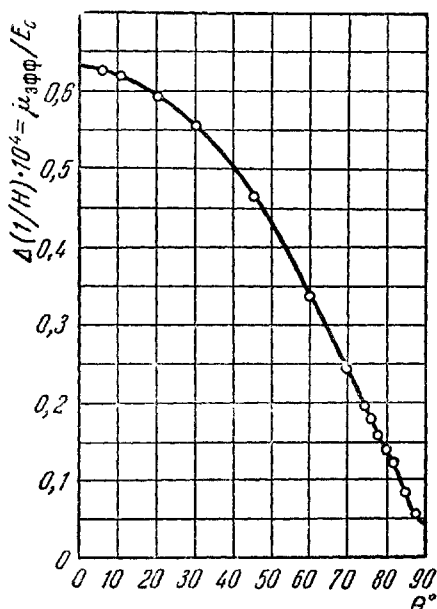


Рис. 17. Зависимости периода осцилляций от направления магнитного поля⁴⁸.

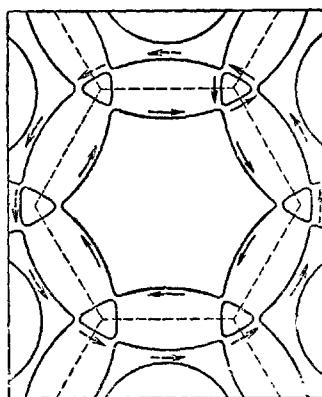


Рис. 18. «Магнитный пробой».

Сплошные стрелки указывают траекторию электрона в сильном магнитном поле; пунктирные стрелки в большом; пунктирные линии — граница зоны Бриллюэна

ких разделенных траекторий (рис. 18). При этом среди гармоник в эффекте де-Гааза — ван-Альфена могут оказаться периоды, которым соответствуют площади, превышающие размеры сечения зоны Бриллюэна даже у металлов с закрытой поверхностью Ферми. Это, по-видимому, наблюдал Пристли на магии²⁹.

Расстояния между классическими траекториями оказываются очень малыми, если эти траектории проходят вблизи точки, в которой вырождение снято каким-либо малым взаимодействием (например, спин-орбитальным). При этом легко оценить поля, в которых должен наблюдаться магнитный пробой: расстояния между уровнями должны быть значительно больше энергии взаимодействия, снимающей вырождение.

§ 7. ДЕ-ГААЗ-ВАН-АЛЬФЕН-ЭФФЕКТ И ТЕОРИЯ ФЕРМИ-ЖИДКОСТИ

Как мы уже говорили, большинство результатов, полученных в предыдущих параграфах, «устойчиво» к переходу от ферми-газа к ферми-жидкости. Однако надо иметь в виду, что закон дисперсии элементарных возбуждений, о котором речь шла ниже, естественно, включает в себя и взаимодействие между электронами. Это соответствует духу теории

ферми-жидкости Ландау. Согласно ² в основе построения спектра ферми-жидкостного типа лежит предположение, что по мере постепенного «включення» взаимодействия между электронами, и с при переходе от газа к жидкости классификация уровней остается неизменной — состояние «электрона» по-прежнему можно описывать заданным номером зоны и квазиимпульсом p , если система не переходит в сверхпроводящее состояние. Роль частиц газа в этой классификации принимают на себя элементарные возбуждения (квазичастицы), каждая из которых обладает определенным импульсом. Они подчиняются статистике Ферми, а их число всегда совпадает с числом частиц в жидкости. Квазичастицу можно в известном смысле рассматривать как частицу, находящуюся в самосогласованном потоке окружающих частиц. При этом естественно, что энергия частицы зависит от состояния окружающих частиц, а энергия всей системы не есть сумма энергии отдельных частиц и является функционалом от функции распределения. Последнее утверждение — основная идея теории ферми-жидкости.

Возможность введения квазичастиц с определенным импульсом (или квазиимпульсом) подтверждается тем, что вероятность столкновения для частицы, находящейся в фермиевской зоне размытия, пропорциональна не только интенсивности взаимодействия, но и квадрату температуры. Это показывает, что при заданной интенсивности взаимодействия неопределенность импульса (или квазиимпульса), связанная с конечностью длины пробега при низких температурах, всегда мала не только по сравнению с самим импульсом, но и по сравнению с шириной фермиевской зоны размытия, пропорциональной первой степени температуры. Таким образом, малым параметром, с помощью которого строится теория ферми-жидкости является не взаимодействие между электронами, а любая величина, характеризующая отклонение функции распределения от фермиевской ступеньки, например температура (или точнее T/ϵ_1).

Если рассматривать только малые отклонения от фермиевской ступеньки, то энергию системы можно представить в виде разложения по отклонению $\chi(p)$ функции распределения от $n_0(\epsilon)$

$$I = I_0 + \int \epsilon \chi(p) d\tau_p - \frac{1}{2} \int \chi(p-p') \chi(p') \chi(p) d\tau_p d\tau_{p'}, \quad (7.1)$$

$$d\tau_p = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} ap_\chi dp, dp$$

Здесь E_0 — энергия основного состояния (при $dn = 0$), $\epsilon = \delta E / \delta n$ — изменение энергии системы при изменении числа частиц на единицу, т. е. энергия квазичастицы, а $f(p, p') = \delta^2 L / \delta n(p) \delta n(p')$ — корреляционная функция — основная величина, характеризующая взаимодействие между частицами в теории ферми-жидкости Ландау². Мы для простоты не учитываем наличия спина у электрона.

Формулы, выведенные в предыдущем параграфе, получены без учета взаимодействия. Учет столкновений электронов с примесями, а также с фононами показывает, что конечность длины свободного пробега электронов не приводит к изменению периодов осцилляции, а уменьшает их амплитуду. Межэлектронное взаимодействие проявляется несколько сложнее. Во первых, столкновения между электронами, обеспечивающие электронную часть сопротивления, несколько уменьшает амплитуду осцилляции. Во вторых, межэлектронное взаимодействие в духе теории ферми-жидкости, как указывалось, входит в закон дисперсии квазичастиц (которые мы выше называли электронами проводимости). Именно этот, включающий межэлектронные взаимодействия закон дисперсии

входит в условия квантования (6,8) и, следовательно, определяет периоды осцилляций. Следует обратить внимание на то, что взаимодействие между электронами входит в периоды только через закон дисперсии. Для доказательства последнего утверждения мы покажем, что расстояния между энергетическими уровнями взаимодействующих электронов проводимости в магнитном поле (в квазиклассическом приближении) определяются по-прежнему известной формулой *)

$$\Delta \epsilon = \hbar \omega_H, \quad \omega_H = \frac{eH}{m^* c}, \quad m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \epsilon}. \quad (7,2)$$

Подчеркнем еще раз: доказательство формулы (7,2) не означает, что взаимодействие между электронами «выпадает» из условия квантования. Оно означает, что взаимодействие входит в условие квантования только через закон дисперсии $\epsilon = \epsilon(p)$, который, как мы говорили, это взаимодействие включает.

Для доказательства формулы (7,2) воспользуемся тем обстоятельством, что в квазиклассическом приближении

$$\epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \Delta \epsilon = \hbar \omega, \quad (7,3)$$

где ω — частота классического движения. Таким образом, нам следует найти частоты классического движения электронов в магнитном поле. Для этого рассмотрим колебания электронной жидкости в магнитном поле.

Состояние электронов описывается функцией распределения $n(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$, которая удовлетворяет кинетическому уравнению

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial n}{\partial \mathbf{p}} \cdot \mathbf{F} = 0 \quad (7,4)$$

Здесь \mathbf{v} — скорость частицы

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \int f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \mathbf{v}(\mathbf{p}') d\tau_{p'}.$$

В случае, который мы рассматриваем, сила, действующая на электрон, есть сила Лоренца

$$\mathbf{F} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}, \mathbf{H}] \quad (7,5)$$

Линеаризуя уравнение (7,3) и учитывая пространственную однородность задачи, легко получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{e}{c} [\mathbf{v}_0, \mathbf{H}] \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{p}} = \\ = - \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \frac{e}{c} \int \mathbf{v}_0 \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \mathbf{v}(\mathbf{p}'), \mathbf{H} \right] d\tau_{p'}, \end{aligned} \quad (7,6)$$

где $\mathbf{v}_0 = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}}$ — скорость частицы при $\mathbf{v} = 0$ ($\mathbf{v}(\mathbf{p}) = n(\mathbf{p}) - n_0(\epsilon)$).

Если ввести новую искомую функцию χ ($\mathbf{v} = - \frac{\partial n_0}{\partial \epsilon} \chi$), а также от переменных p_x, p_y, p_z перейти к переменным ϵ, τ, p_z , где τ — время

*) Чтобы результаты «газового» и «жидкостного» рассмотрения совпадали, необходимо не только совпадение спектров, но и плотности состояний. Тот факт, что плотность состояний ферми-жидкости совпадает с плотностью состояний ферми-газа, будет доказан одновременно с формулой (7,2).

движения по квазиклассической траектории, то кинетическое уравнение (7,6) легко записать в следующей форме *):

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + \frac{\partial \chi}{\partial \tau} = \int F(p_z, \tau; p'_z, \tau') \chi(p'_z, \tau') dp'_z d\tau' \quad (7,7)$$

Выражение для функции $F(p, \tau; p'_z, \tau')$ определяется из сравнения с интегральной частью уравнения (7,6). Интегрирование в (7,6) ведется по ферми-поверхности, так как $\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = -\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$. Решение уравнения (7,6) будем искать в следующей форме:

$$\chi(p_z, \tau; t) = i e^{-i\omega t} \sum_n \chi_n(p_z) e^{i n \omega_H(p_z) \tau}, \quad (7,8)$$

что оправдано периодической зависимостью функции распределения от τ (мы не оговорили, что рассматриваем, естественно, замкнутые сечения ферми-поверхности).

Подставляя разложение (7,8) в уравнение (7,7), имеем

$$[\omega - n\omega_H(p_z)] \chi_n(p_z) = \sum_{n'} \int F_{nn'}(p_z, p'_z) \chi_{n'}(p'_z) dp'_z \quad (7,9)$$

(мы не выписываем связи между F и $F_{nn'}$). Для простоты будем считать оператор $F_{nn'}$ вырожденным, т. е. предположим, что

$$F_{nn'} = \delta_{nn'} g_n(p_z) g_n^*(p'_z). \quad (7,10)$$

Из дальнейшего вывода будет ясно, что это упрощающее предположение не затрагивает основного результата. Из (7,10) и (7,9) получаем

$$[\omega - n\omega_H(p_z)] \chi_n(p_z) = g_n(p_z) \langle \chi_n, g_n \rangle, \quad (7,11)$$

где

$$\langle \chi_n, g_n \rangle = \int \chi_n(p'_z) g_n^*(p'_z) dp'_z \quad (7,12)$$

— скалярное произведение функций $g_n(p_z)$ и $\chi_n(p_z)$. Так как нас интересуют расстояния между соседними уровнями, рассмотрим случай $n=1$:

$$[\omega - \omega_H(p_z)] \chi_1(p_z) = g_1 \langle \chi_1, g_1 \rangle$$

Из последнего уравнения имеем $\langle \chi_1, g_1 \rangle = \int \frac{|g_1|^2 dp_z}{\omega - \omega_H(p_z)} \langle \chi_1, g_1 \rangle$, откуда

дисперсионное уравнение для определения частот колебаний ω записывается следующим образом.

$$1 = \int \frac{|g_1|^2 dp_z}{\omega - \omega_H(p_z)} \quad (7,13)$$

Для анализа этого уравнения удобно перейти от непрерывных значений импульса к дискретным, скажем, учтя квантование импульса обусловленное границами металла. Тогда уравнение (7,13) имеет вид

$$1 = \sum \frac{|g_1|^2 \Delta p_z}{\omega - \omega_H(p_z)}, \quad (7,14)$$

*) Простота левой (полевой) части кинетического уравнения в переменных p_z, ε, τ связана с тем, что p_z и ε сохраняются в постоянном и однородном магнитном поле, а τ канонически сопряжено ε .

в котором p_z принимает дискретный набор значений $p_z^{(k)}$. На рис. 19 изображено графическое решение уравнения (7,14), из которого видно, что корни его расположены между значениями $\omega_H(p_z^{(k)})$. Кроме того, имеется «отщепленный» корень (рис. 19). При «возвращении» к непрерывному спектру (скажем, при стремлении размеров образца к бесконечности) частоты колебаний стремятся к значениям $\omega_H(p_z)$. Кроме того, появляется отщепленная частота, которая соответствует нульзвуку в ферми-жидкости³⁰. Так как частоты ω расположены строго между значениями $\omega_H(p_z^{(k)})$, ясно, что спектральная плотность (количество частот на интервал $(p_z, p_z + dp_z)$) ферми-жидкости такая же, как спектральная плотность ферми-газа.

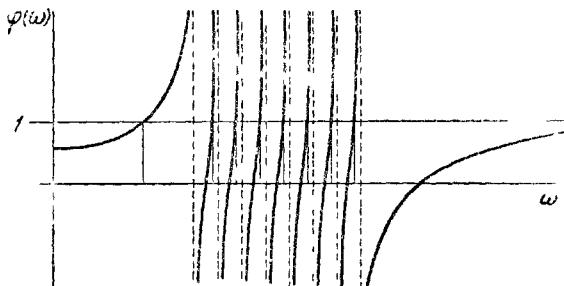


Рис. 19. Графическое решение дисперсионного уравнения (7,14).

$$\varphi(\omega) - 1, \quad \varphi(\omega) = \sum \frac{|g_1|^2 \Delta p_z}{\omega - \omega_H(p_z)}.$$

Заметим, что для квадратичного закона дисперсии ω_H не зависит от p_z . Частота колебаний при этом, естественно, равна eH/mc .

Итак, формулы (7,1) определяют квазиклассическое квантование уровней энергии ферми-жидкости в магнитном поле. Тем самым показано, что формулы предыдущего параграфа (в смысле периодов осцилляций) справедливы не только для ферми-газа, но и для ферми-жидкости. если под $\varepsilon(p)$ понимать закон дисперсии, включающий взаимодействие между электронами в основном состоянии³¹).

§ 8. ЭФФЕКТ ДЕ-ГААЗА—ВАН-АЛЬФЕНА (СПЕЦИАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ)

Обсудим некоторые специальные вопросы, примыкающие к теории эффекта де-Гааза — ван-Альфена.

В работе³¹ рассмотрен эффект де-Гааза — ван-Альфена в тонких металлических слоях. Исходным предположением этой работы было представление об ограниченном металле как о потенциальном ящике. Основываясь на этом предположении в цитированной работе вычислены квазиклассические уровни энергии электрона проводимости (см. формулы (5,16) — (5,22) из¹) и исследована зависимость осциллирующей части магнитного момента от магнитного поля и от размеров пленки. В частности, в работе показано, что период осцилляций в пленке, параллельной магнитному полю, совпадает с периодом в массивном металле, если орбита электрона, соответствующая экстремальной площади сечения поверхности Ферми, помещается в пленке (первый из рис. 11 в¹). Если «экстремальная» орбита не помещается в пленке (второй рис. 11), то период $\tilde{\Omega}$ (и \tilde{M}) определяется площадью, ограниченной траекторией электрона в импульсном пространстве и прямыми $P_x = p_x \pm eH/cd$, где d — полутолщина пленки, ось z , как всегда, направлена вдоль магнитного поля, ось y перпендикулярна к поверхности пленки. В этом случае период

*) Приведенное выше доказательство было впервые получено И. М. Лифшицем (1957 г.). В последнее время этот факт подтвержден прямым вычислением в работе Бычкова и Горькова¹³.

в обратных полях, естественно, зависит от размеров пленки и от магнитного поля.

Изложенная здесь картина зависимости осцилляционных эффектов от размеров пленки справедлива, как мы указывали, только в том случае, если стенки металла можно рассматривать как бесконечно высокий потенциальный барьер. Иначе говоря, в работе ³¹ предположено зеркальное отражение электронов от границы. В действительности рассеяние электрона, по-видимому, ближе к диффузному. Это означает, что при столкновении с границей электрон «забывает» о своем движении до столкновения. Поэтому, в частности, условия отражения формулируются не для отдельного электрона, а для функции распределения электронов ³².

При диффузном рассеянии электронов на границе металла характер зависимости осциллирующей части магнитного момента от магнитного поля и от размеров пленки другой. Если экстремальная орбита помещается в пленке, то период осцилляций в пленке по-прежнему не отличается от периода в массивном металле. Если же траектория не помещается в пленке, то соответствующая гармоника в осциллирующей зависимости магнитного момента от магнитного поля имеет значительно меньшую амплитуду — она «выпадает» (М. Азбель ³³). Это обстоятельство дает дополнительные возможности для определения формы поверхности Ферми по экспериментальным данным (§ 9).

Как мы уже отмечали, наблюдаемая на эксперименте зависимость магнитного момента от магнитного поля очень сложна, причем у многих металлов кривые $M = M(H)$ содержат гармоники, отвечающие очень малым периодам. Для их «разрешения» используют большие магнитные поля ($\sim 10^5$ э), так как согласно (6,18) период пропорционален квадрату магнитного поля. Большие магнитные поля в настоящее время чаще всего получают, применяя импульсную методику. При этом благодаря скин-эффекту электроны оказываются помещенными в неоднородное магнитное поле. Анализ роли неоднородности (А. Косевич ^{34, 35}) показывает, что для возможности интерпретации получающихся экспериментальных данных, т. е. для того, чтобы наблюдаемые периоды были связаны с экстремальными сечениями поверхности Ферми, необходимо выполнение ряда условий *).

Обозначим характерные размеры образца (толщину пленки, например) через L , характерное время изменения магнитного поля через T_0 , а через δ — глубину скин-слоя ($\delta \sim \sqrt{c^2 T_0 \rho}$, ρ — удельное сопротивление образца в максимальном магнитном поле H_m). Тогда условия, о которых шла речь, можно записать следующим образом ³⁴:

либо

$$\omega_H T_0 \gg \frac{\delta}{a} \gg \frac{L}{a} > \frac{r_m}{a}, \quad (8,1)$$

либо

$$L \cdot \delta \gg r_m, \quad \text{а} \quad \omega_H T_0 \gg \frac{\delta}{a}. \quad (8,1')$$

Здесь a — межатомные размеры, а r_m — радиус орбиты электрона в поле H_m . Отметим, что в работах ^{36, 37}, в которых, используя импульсную методику, обнаружены и исследованы осцилляции магнитной восприим-

*) Амплитуда осцилляций при применении импульсных (неоднородных) полей, естественно, меньше, чем в постоянных. Однако использование экспериментальной методики, в которой измеряется не $M(H)$, а dM/dH , облегчает наблюдение эффекта³⁶, так как дифференцирование эквивалентно умножению на множитель cS_m/ehH , значительно больший единицы.

чивости ряда металлов первой группы таблицы Менделеева, условия (8,1) выполняются.

Мы неоднократно отмечали, что осцилляционные эффекты, обязанные своим происхождением осцилляциям плотности состояний электронов, могут проявляться не только в осцилляторной зависимости магнитного момента от магнитного поля, но и в зависимости любых термодинамических и кинетических величин от магнитного поля. Действительно, экспериментально обнаружены осцилляции сопротивления, поля Холла, теплопроводности и термомагнитных характеристик различных металлов. Теория кинетических свойств металлов в магнитном поле будет изложена в третьей части настоящего обзора.

Здесь мы остановимся только на возможностях наблюдения осцилляций контактной разности потенциалов ²⁶ и туннельного тока ³⁴.

Контактная разность потенциалов $\delta\phi$ между двумя образцами, из которых один помещен в магнитное поле, с точностью до постоянного слагаемого, связанного с различием состояний поверхности образцов, определяется разностью их химических потенциалов

$$e\delta\phi = \zeta(H) - \zeta(0). \quad (8,2)$$

Согласно ²⁶ эта разность равна

$$e\delta\phi = \frac{2\sqrt{2\pi}}{v(\epsilon_F)} \left(\frac{e\hbar H}{c} \right)^{3/2} \sum_m \left| \frac{\partial^2 S_m}{\partial p_z^2} \right|^{-1/2} \times \\ \times \sum_k \frac{\Psi(k\lambda)}{k^{3/2}} \sin \left\{ k \left(\frac{eS_m}{e\hbar H} - \pi \right) - \frac{\pi}{4} \right\} \cos \left(\pi k \frac{m^*}{m_0} \right) \quad (8,3)$$

(обозначения те же, что и в § 6). Численные оценки показывают, что амплитуда осцилляций контактной разности потенциалов порядка или даже несколько больше 10^{-6} в (конечно, при достаточно низкой температуре ($\hbar\omega_H > T$)).

Туннельный диод — два металла, разделенные тонкой ($\sim 10^{-7}$ – 10^{-6} см) диэлектрической прослойкой, — как известно, успешно используется для определения величины энергетической щели у сверхпроводников. В. Барьяхтар и В. Макаров ³⁵ предложили использовать такой прибор для одновременного измерения экстремальных сечений и соответствующих им эффективных масс.

Расчет туннельного тока j при разности потенциалов, равной ϕ , в магнитном поле, перпендикулярном к разделяющей пленке, приводит к следующему результату:

$$\tilde{j} = \sum_m \sum_{k=1}^{\infty} A_m(k) \sin \left\{ k \left(\frac{eS_m}{e\hbar H} - \pi \frac{e\phi}{\hbar\omega_H} \right) - \beta_m \right\} \sin \left(\pi \frac{e\phi}{\hbar\omega_H} k \right). \quad (8,4)$$

Суммирование в формуле (8,4) ведется по всем экстремальным сечениям ферми-поверхности, на которых $v_z \geq 0$:

$$A_m(k) = - \frac{e}{4\pi^2 \hbar} \left(\frac{eH}{ck} \right)^2 \left\{ \frac{\partial S}{\partial \epsilon} \frac{\partial v_z}{\partial p_z} \frac{D}{\partial^2 S} \Psi(k\lambda) \right\}_{p_z = p_{zm}}. \quad (8,5)$$

а

$$\beta_m = -\pi \pm \frac{\pi}{2}. \quad (8,6)$$

Знак плюс в формуле (8.6) ставится в том случае, когда экстремальное сечение является минимальным, а минус — максимальным.

Как видно из формулы (8.4), туннельный ток осциллирует не только при изменении магнитного поля (периоды этих осцилляций те же, что и в эффекте де-Гааза—ван-Альфена, однако число гармоник меньше, так как выпадают гармоники с $\nu_i < 0$), но и при изменении приложенного напряжения φ , причем период осцилляций по φ определяется эффективными массами, связанными с экстремальными сечениями. Согласно численным оценкам амплитуды осцилляций туннельного тока $\tilde{j} \sim 10^{-6} j_0$, где j_0 — монотонная часть тока, проходящего через туннельный диод.

§ 9. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПО ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМ ДАННЫМ*)

В настоящее время используют весьма разнообразные методы для определения энергетического спектра конденсированных систем (поглощение ультразвука, гальваномагнитные явления, аномальный скин-эффект, эффект де-Гааза—ван-Альфена, неупругое рассеяние нейтронов, характеристические потери электронов и др.).

Если речь идет об определении бозевских ветвей спектра, то, по-видимому, наиболее перспективными и дающими наиболее полную информацию методами являются те, которые основаны на взаимодействии проникающих частиц с известным энергетическим спектром (нейтронов, электронов со сравнительно большой энергией, фотонов) с изучаемыми элементарными возбуждениями. Так как при выполнении условий, аналогичных условию черенковского излучения, проникающая частица возбуждает одно элементарное возбуждение («рождает» бозон с энергией ϵ и квазимпульсом — или импульсом — p), по исследованию неупругого рассеяния частиц (нейтронов и т. д.) можно полностью восстановить закон дисперсии элементарных возбуждений $\epsilon(p)$. Такой метод успешно применялся для экспериментального определения фононно-ротонного спектра в He II, фононного спектра ряда твердых тел (по неупругому рассеянию нейтронов), плазменных колебаний электронов в металле (по спектрам характеристических потерь электронов, прошедших через тонкие пленки) и пр.

Как известно, для расчета термодинамических характеристик достаточно знания плотности уровней $\nu(\epsilon)$, которая в случае бозевских ветвей спектра принципиально может быть определена по температурной зависимости теплоемкости и других термодинамических величин⁴⁰. Однако этот метод слабо устойчив и потому требует огромной точности экспериментальных данных⁴⁰.

Вернемся к фермиевским ветвям энергетического спектра. Как неоднократно отмечалось, об одноэлектронном энергетическом спектре (в смысле фермионов) можно говорить только в тех случаях, когда «электрон» либо «дырка» находится вблизи поверхности Ферми. Поэтому задача восстановления электронного энергетического спектра (или электронной динамической структуры металла) очень суживается — необходимо определить форму ряда изоэнергетических поверхностей, расположенных вблизи поверхности Ферми. Так как скорость электронов $v = \partial \epsilon / \partial p$, для этого достаточно определить форму поверхности Ферми и распределение скоростей на ней. Что касается энергетических уровней, расположенных далеко от граничной энергии ϵ_F , то для этих энергий, по-видимому, может

*) Вопросам определения электронного энергетического спектра металлов по экспериментальным данным посвящен подробный обзор А. Шипарда³⁹.

стоять вопрос только об определении плотности электронных состояний на единичный интервал энергий ν (ϵ). Последняя величина может быть получена из рентгеновских спектров поглощения. Кроме того, высказывалось предложение ⁴¹ использовать наблюдение γ -квантов, образующихся в результате поглощения позитронов в металле, для «прощупывания» глубинных электронных уровней энергии.

Как показали исследования последних лет, имеется большое число явлений, чувствительных к анизотропии закона дисперсии электронов проводимости (аномальный скин-эффект, эффект де-Гааза—ван-Альфена, циклотронный резонанс, поглощение ультразвука в магнитном поле и др.). Все они позволяют получить те или иные сведения об энергетическом спектре электронов. Полную расшифровку электронной динамической структуры, по-видимому, можно произвести, только используя разнообразные методы исследования. Наибольшее развитие получили методы определения электронного спектра, использующие измерения в сравнительно большом магнитном поле *) (эффект де-Гааза—ван-Альфена, циклотронный резонанс, поглощение ультразвука в магнитном поле, гальваномагнитные явления).

Этот параграф посвящен выяснению возможностей определения электронного энергетического спектра на основании наблюдения эффекта де-Гааза—ван-Альфена ⁴². При изложении мы будем исходить из главных осцилляционных членов в магнитном моменте, т. е. из тех членов, которые обусловлены экстремальными сечениями поверхности Ферми (см. § 6). Исходным выражением при этом является формула (6,19), из которой видно, что зависимость периода каждой гармоники Δ ($1/H$) от направления магнитного поля *определяет* зависимость от углов площадей экстремальных сечений S_m . Измерение амплитуды гармоник и их температурной зависимости дает возможность получить значение производной $\partial S_m / \partial \xi = 2\pi m^* (\xi, p_{zm})$. Однако что касается определения эффективной массы, то надо учитывать замечания, сделанные в § 6 и 7 о влиянии взаимодействий на величину амплитуды осцилляций. Так как период осцилляций даже при учете взаимодействий выражается в терминах закона дисперсии (см. § 7), а амплитуда нет, то очевидно, что эффект де-Гааза—ван-Альфена весьма удобен для определения формы поверхности Ферми, но дает значительно менее надежные данные относительно распределения скоростей на ней (о связи между эффективной массой и скоростью $v = \partial \epsilon / \partial p$ см. ниже).

Пусть ξ — единичный вектор в направлении магнитного поля, а $\sigma(\xi) \equiv [S_m(\xi)]_\xi$ — экстремальная площадь сечения поверхности Ферми $\epsilon(p) = \xi$ плоскостью, перпендикулярной к ξ . Тогда согласно (6,19)

$$\sigma(\xi) = \frac{2\pi e h}{c \Delta_\xi}, \quad (9,1)$$

где Δ_ξ — период (в обратных полях) соответствующей гармоники осцилляций.

Предполагается, что искомая поверхность Ферми имеет центр симметрии и что всякий луч, проведенный из центра, встречает поверхность лишь в одной точке. В том случае, когда поверхность Ферми распадается на несколько замкнутых поверхностей, дальнейшие рассуждения относятся к каждой из них.

*) Для всех этих методов необходимо, чтобы было выполнено условие $\omega_H \tau \gg 1$, которое показывает, что электрон между соударениями (τ — время свободного пробега) совершает достаточное число оборотов в магнитном поле.

Для поверхностей, обладающих указанным свойством, экстремальное сечение является центральным. Обозначим длину радиуса-вектора, проведенного из центра поверхности в направлении e , через $q(e)$. Тогда

$$\sigma(\xi) = \frac{1}{2} \int q^2(e) \delta(e\xi) d\Omega_e, \quad (9,2)$$

где $\delta(x)$ — дираковская δ -функция, $d\Omega_e$ — элемент площади единичной сферы. Другими словами,

$$\sigma(\xi) = \overline{q^2(e)}|_{e\xi=0}, \quad (9,3)$$

т. е. $\sigma(\xi)$ — среднее значение квадрата радиуса вектора $q(e)$ по экватору, заданному условием $e\xi = 0$.

Таким образом, построение поверхности сводится к задаче определения функции $q^2(e)$ ($q(-e) = q(e)$) по ее средним значениям на экваторе $e\xi = 0$ при произвольном ξ .

Решение этой задачи может быть получено на основании следующего соотношения, справедливого, как в этом можно убедиться прямым вычислением, для произвольной функции $\psi(\xi) = \psi(-\xi)$, заданной на единичной сфере:

$$\int \bar{\psi}(\xi) d\Omega - \int_{z^2 > \lambda^2} \frac{\bar{\psi}(\xi) z}{\sqrt{z^2 - \lambda^2}} d\Omega = \int_{z^2 > 1 - \lambda^2} \psi(\xi) d\Omega, \quad z = (e\xi), \quad \lambda^2 < 1. \quad (9,4)$$

Здесь $\bar{\psi}(\xi)$ обозначает среднее значение функции $\psi(e)$ на экваторе $e\xi = 0$; область интегрирования на поверхности единичной сферы определена неравенствами.

Полагая $\psi(\xi) = \pi q^2(\xi)$, $\bar{\psi}(\xi) = \sigma(\xi)$, имеем при достаточно малых λ

$$\pi q^2(e) = \left\{ \int \sigma(\xi) d\Omega - \int_{z^2 > \lambda^2} \frac{\sigma(\xi) z}{\sqrt{z^2 - \lambda^2}} d\Omega \right\} / \pi \lambda^2, \quad z = \xi e. \quad (9,5)$$

Переходя к пределу $\lambda \rightarrow 0$, получим

$$\pi q^2(e) = \chi_e(0) - \int_0^1 [\chi_e(u) - \chi_e(0)] \frac{du}{u^2}, \quad (9,6)$$

$$\chi_e(u) = \overline{\sigma(\xi)}|_{\xi e = z} = \frac{1}{2\pi} \int \sigma(\xi) \delta(\xi e - u) d\Omega_\xi.$$

Если в каждом случае выбирать направление e за полярную ось координатной системы и ввести угол $\cos \theta = \xi e$, а также полярный угол φ в плоскости, перпендикулярной к e , то, обозначая $\sigma(\xi)$ через $\sigma_e(\cos \theta, \varphi)$, мы можем, проинтегрировав по частям, записать приведенное выражение в виде

$$\pi q^2(e) = \sigma(e) - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \frac{\partial \sigma_e(\cos \theta, \varphi)}{\partial \cos \theta} \frac{d \cos \theta}{\cos \theta}. \quad (9,6a)$$

Полученная формула (9,6) решает поставленную задачу; впрочем, для численных расчетов удобнее, по-видимому, пользоваться формулой (9,5), выбрав конечное значение $\lambda \ll 1$.

Как видно из формулы (9,6), полученное решение является устойчивым; при этом средняя погрешность в определении формы поверхности связана с погрешностью определения площади $\sigma(\xi)$ (т. е. периода $\delta(1/H)$). По порядку величины $\delta q^2 \sim \delta \sigma$.

Воспроизведя форму поверхности, мы тем самым получим значение $\partial^2 S(\xi, p_z)/\partial p_z^2$, которое, таким образом, не представляет собой независимого параметра. Дополнительным параметром является значение $\partial S_m/\partial \xi$, которое может быть определено из измерений величины амплитуд осцилляций или их температурной зависимости. Зная значение $\partial S_m/\partial \xi$ как функцию направлений магнитного поля ξ , мы можем восстановить величину скоростей электронов на граничной поверхности.

В самом деле, скорость v определяется равенством $v = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p}$. Если мы рассмотрим наряду с поверхностью $\varepsilon(p) = \xi$ соседнюю поверхность $\varepsilon(p) = \xi + \delta \xi$, то

$$v = |\nabla \varepsilon| = \frac{\delta \xi}{\delta n},$$

где δn обозначает расстояние между этими поверхностями по нормали. С другой стороны, для соседней поверхности площадь экстремального сечения будет

$$S_m(\xi + \delta \xi) = S_m(\xi) + \delta \xi \frac{\partial S_m}{\partial \xi}.$$

Для поверхностей, о которых здесь идет речь, экстремальное сечение совпадает с центральным ($p_z = 0$). Поэтому производная по химическому потенциалу, по сути дела, берется при постоянном p_z , т. е. $\frac{\partial S_m}{\partial \xi} = 2\pi m^*$, или в прежних обозначениях

$$\delta \sigma(\xi) = \delta \xi \left. \frac{\partial S_m}{\partial \xi} \right|_{\xi}.$$

Согласно (9,6) это дает возможность вычислить $\delta q^2(e)$, а следовательно и $\delta n = \delta q(en)$. Это и решает задачу:

$$\frac{1}{v(e)} = \frac{(en)}{q(e)} \left\{ m^*(e) - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \frac{\partial m^*(\cos \theta, \varphi)}{\partial (\cos \theta)} \frac{d \cos \theta}{\cos \theta} \right\}. \quad (9,7)$$

Зная форму поверхности $q(e)$, мы можем найти заключенный в ней объем и, следовательно, число электронов в соответствующей зоне.

Наблюдение эффекта де-Гааза — ван-Альфена на тонких монокристаллических пленках открывает дополнительные возможности для определения формы поверхности Ферми³³. Для этого согласно § 8 можно воспользоваться тем, что вклад тех электронов, размер орбиты которых превышает поперечные размеры пленки, значительно меньше, чем вклад электронов, орбита которых помещается в пленке. Так как размер орбиты обратно пропорционален напряженности магнитного поля, изменение магнитного поля будет приводить к резкому возрастанию (при $H = H_k$) квантовых осцилляций с определенным периодом, который определяется теми электронами, орбита которых «влезла» в пленку. Если магнитное поле параллельно поверхности пленки, то критическое поле H_k (поле, при котором наблюдается скачкообразное изменение амплитуды осцилляций) определяет диаметр D сечения поверхности Ферми в направлении, перпендикулярном к магнитному полю и нормали к поверхности пленки:

$$D = \left| \frac{e H_k d}{c} \right|,$$

где d — толщина пленки. Изменяя направление поля и используя различным образом ориентированные пленки, принципиально можно построить поверхность Ферми непосредственно по диаметрам D . Преимущество

такого метода определения формы поверхности Ферми в том, что сама пленка производит нечто, напоминающее фурье-анализ. Так как кривые зависимости магнитного момента от магнитного поля весьма сложны (осцилляции, как правило, содержат большое число гармоник), расшифровка экспериментальных кривых — очень трудная и часто неоднозначно решаемая задача. Использование тонких пленок, по-видимому, может облегчить решение ее. Однако окончательная расшифровка электронных структур возможна только при учете результатов разнородных экспериментов.

В заключение этого параграфа отметим, что наблюдение эффекта де-Гааза — ван-Альфена помогло расшифровать структуру ряда металлов¹³.

§ 10. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ОСЦИЛЛЯЦИОННЫХ ЯВЛЕНИЙ¹⁴

Рассмотрение осцилляций термодинамических величин в магнитном поле (§ 6—9) показывает, что причиной их является осцилляция плотности состояний, причем роль магнитного поля сводится только к квантованию уровней энергии. Очевидно, аналогичный эффект должен иметь место всегда, когда имеются условия для квантования энергии. При этом должна наблюдаться осциллирующая зависимость от параметров, определяющих положение уровней энергии электрона, если расстояние между уровнями порядка или больше температуры, но значительно меньше энергии Ферми.

Общая теория осцилляционных явлений может быть построена, если воспользоваться известными уравнениями квазиклассического квантования, согласно которым адиабатические инварианты I_i системы, совершающей финитное движение, приравняются полуделым значениям постоянной Планка:

$$I_i = \left(n_i + \frac{1}{2} \right) h, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (10,1)$$

Если «классическая» задача о движении электрона с произвольным законом дисперсии решена, то его энергия может быть выражена через адиабатические инварианты

$$\varepsilon = \varepsilon(I_1, I_2, I_3),$$

а с помощью условий (10,1) могут быть получены квантованные уровни энергии

$$\varepsilon(n) = \varepsilon \left[\left(n_1 + \frac{1}{2} \right) h, \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) h, \left(n_3 + \frac{1}{2} \right) h \right]. \quad (10,2)$$

Вектором n мы обозначили совокупность трех целых чисел n_1, n_2, n_3 .

Использование квазиклассических уровней энергии делает всю теорию применимой только к тому случаю, когда расстояния между уровнями значительно меньше граничной энергии ε_F . Этого приближения, конечно, достаточно, так как (как неоднократно указывалось) осцилляции возникают только в этом предельном случае.

Применявшееся раньше условие квантования (6,7), конечно, является частным случаем условий (10,2). Адиабатическим инвариантом в случае электрона, движущегося в магнитном поле, является величина cS/eH .

Знание квантовых уровней энергии (10,2) позволяет вычислить осцилляционную часть термодинамического потенциала

$$\Omega = -T \sum_n \ln \left\{ 1 + e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon(n)}{T}} \right\}.$$

Воспользовавшись трехмерным аналогом формулы Пуассона, имеем

$$\Omega = -T \int \ln \left\{ 1 + e^{\frac{\xi - \varepsilon(\mathbf{n})}{T}} \right\} d\mathbf{n} - 2 \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{k}} L_{\mathbf{k}} + \dots, \quad (10,3)$$

где

$$L_{\mathbf{k}} = -T \int \ln \left\{ 1 + e^{\frac{\xi - \varepsilon(\mathbf{n})}{T}} \right\} e^{2\pi i \mathbf{k} \mathbf{n}} d\mathbf{n},$$

а под вектором \mathbf{k} следует понимать совокупность трех целочисленных индексов k_1, k_2, k_3 . Суммирование ведется по всем положительным значениям k_i ($i = 1, 2, 3$), кроме $k_i = 0$.

Так как интегрирование по \mathbf{n} производится только в первом октанте ($0 \leq n_i \leq \infty, i = 1, 2, 3$), за счет разрыва подынтегральной функции на границе области интегрирования наряду с трехмерными интегралами $L_{\mathbf{k}}$ в результат войдут двумерные и одномерные интегралы, явного вида которых мы не выписываем.

Проведя вычисления, аналогичные тем, которые были проведены в § 6, получим, что осциллирующая часть $L_{\mathbf{k}}$ имеет следующий вид:

$$\bar{L}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{V \sqrt{k_1^2 + k_2^2 + k_3^2}} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\psi(\lambda_{\mathbf{k}}) e^{2\pi i \mathbf{k} \mathbf{n}_{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, \xi) + i\varphi_{\mathbf{v}}}}{\left(\mathbf{k} \frac{\partial \mathbf{n}_{\mathbf{v}}}{\partial \xi} \right)^2 \left| \nabla \varepsilon(\mathbf{n}_{\mathbf{v}}) \right| \left| K_{\mathbf{v}}(\xi) \right|}. \quad (10,4)$$

Через $\mathbf{n}_{\mathbf{v}} = \mathbf{n}_{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, \xi)$ здесь обозначены радиусы-векторы в пространстве \mathbf{n} тех точек поверхности $\varepsilon(\mathbf{n}) = \xi$, в которых направление нормали к поверхности параллельно вектору \mathbf{k} ; $K_{\mathbf{v}}(\xi)$ — гауссова кривизна поверхности в этих точках, $\lambda_{\mathbf{k}} = 2\pi^2 \left(\mathbf{k} \frac{\partial \mathbf{n}_{\mathbf{v}}}{\partial \xi} \right) T$, $\varphi_{\mathbf{v}} = \pm \pi/2$, если $\mathbf{n}_{\mathbf{v}}$ — эллиптическая точка, причем знак минус соответствует тому случаю, когда выпуклость поверхности в данной точке обращена в сторону \mathbf{k} , а знак плюс — в противоположном случае; в случае гиперболической точки $\varphi_{\mathbf{v}} = 0$. Двумерных и одномерных слагаемых мы опять не выписываем.

Подставляя асимптотические выражения для $L_{\mathbf{k}}$ (10,4) (а также опущенные здесь двумерные и одномерные слагаемые) в формулу (10,3), мы получим осциллирующую часть потенциала Ω . Для выяснения периода осцилляций необходимо знать зависимость $\mathbf{n}_{\mathbf{v}}$, т. е. адиабатических инвариантов I_i , от параметров, определяющих положение квантованных уровней энергии, причем из формулы (10,4) видно, что периоды осцилляций определяются условием

$$\Delta I_i^{(\mathbf{v})} = h,$$

где символом ΔI_i обозначено изменение i -го адиабатического инварианта за счет изменения параметров, определяющих финитное движение электрона. Следует иметь в виду, что $\bar{\Omega}$ является суммой большого числа слагаемых одного порядка, каждый из которых имеет свой период. Так как отношения этих периодов, вообще говоря, произвольны, осцилляции могут принимать очень сложный вид.

ПРИЛОЖЕНИЕ

1 К ВОПРОСУ ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ПОНЯТИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ МАССЫ ЭЛЕКТРОНА ПРОВОДИМОСТИ

Динамические свойства свободного электрона полностью определяются его массой. Как было показано в ¹, динамика электрона проводимости существенно зависит от его закона дисперсии. В связи с этим введение «эффективной массы» — неодно-

значная процедура. В ¹ эффективная масса m^* вводилась из выражения для периода обращения в магнитном поле. Такое определение удобно, так как m^* сохраняет свое значение при движении электрона в магнитном поле. При движении в слабых полях (электрическом и магнитном), когда в линейном приближении по силе, действующей на электрон, можно пренебречь изменением квазинимпульса электрона за время свободного пробега (если интересоваться его пространственным движением), удобно пользоваться понятием «тензор обратных эффективных масс».

Действительно, классические уравнения движения электрона имеют вид ¹

$$\frac{dp_i}{dt} = F_i, \quad v_i = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_i}.$$

Так как $v_i = \frac{dx_i}{dt}$, отсюда имеем

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_k} F_k. \quad (11.1)$$

Если не учитывать нелинейных по силе членов, то тензор $\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_k}$ можно считать постоянным. Он носит название тензора обратных эффективных масс и обозначается $\left(\frac{1}{m}\right)_{ik}$:

$$\left(\frac{1}{m}\right)_{ik} = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_k}. \quad (11.2)$$

Нужно отметить, что в произвольной точке p -пространства тензор обратных эффективных масс имеет три не совпадающих ни по величине, ни по знаку главных значения $\left(\frac{1}{m_1} \neq \frac{1}{m_2} \neq \frac{1}{m_3}\right)$. Вблизи минимумов и максимумов энергии главные значения тензора эффективных масс $\frac{1}{m_i}$ имеют одинаковые знаки $\left(\frac{1}{m_i} > 0\right)$ вблизи минимума, $\frac{1}{m_i} < 0$ вблизи максимума).

2. ДВИЖЕНИЕ В ПЕРЕМЕННОМ И НЕОДНОРОДНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

В постоянном магнитном поле напряженности H электрон, находящийся на замкнутой изоэнергетической поверхности, движется по траектории, определяемой уравнениями (см. § 3 в ¹)

$$p_H = \text{const}, \quad \varepsilon(p_x, p_y, p_H) = \text{const}. \quad (11.3)$$

В этом случае движущийся электрон подобен неподвижному «токовому лестничку».

Как показывает рассмотрение, проведенное в ¹⁵, движение в медленно меняющемся слабо неоднородном магнитном поле можно представить себе как дрейф, поворот и деформацию «токового лестничка», причем характер этого медленного движения легко уславливается из того факта, что отношение площади сечения изоэнергетической поверхности S к магнитному полю H является адиабатическим инвариантом ^{*}). Заметим еще, что в этом случае скорость центра «токового лестничка» совпадает в каждой точке с направлением магнитного поля.

Если уравнение (11.3) описывает открытую траекторию, то следует различать два случая:

а) Кривая (11.3) является периодической, т. е. направление открытости параллельно какому-либо вектору обратной решетки. Главное отличие от случая замкнутых сечений связано с тем, что скорость не направлена вдоль магнитной силовой линии, в результате чего S/H не является адиабатическим инвариантом. Однако

^{*}) Если магнитное поле — медленная функция времени, то утверждение, что S/H — адиабатический инвариант, ясно видно из условия квантования (см. формулу (6.8)). Если $H(r)$ — медленно меняющаяся функция координаты, то уравнения движения электрона имеют крайне простой вид:

$$\frac{S(\varepsilon, p_H)}{H(r)} = \text{const}, \quad \varepsilon = \text{const}, \quad \dot{r} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p}.$$

общий характер движения весьма похож на движение по замкнутой траектории. Так, роль периода играет время, за которое электрон проходит одну элементарную ячейку обратной решетки.

б) Кривая (П, 3) не является периодической кривой, т. е. направление открытости не параллельно какому-либо вектору обратной решетки.

При усреднении по аperiodической траектории интегрирование вдоль открытой траектории, проходящей через бесконечное множество элементарных ячеек *), можно заменить суммой интегралов по эквивалентным участкам внутри одной ячейки (рис. 20). В случае аperiodической траектории эти участки заполняют плотно элементарную ячейку. Отсюда следует, что средние величины, характеризующие медленное движение, не могут зависеть от p_H — проекции импульса на магнитное поле. Естественно, что зависимостью средних от p_H можно пренебречь и для периодических траекторий, если период их значительно больше \hbar/a (a — среднее расстояние между атомами). Это обстоятельство (независимость средних от p_H) существенно изменяет характер медленного движения.

Наиболее интересная ситуация возникает, если при движении в поле, медленно меняющемся в пространстве и во времени, совершается переход от одного режима движения к другому. В этом случае имеет место явление, очень напоминающее рассеяние на силовом центре.

Области в p -пространстве с различными режимами движения отделены друг от друга участками самопересекающейся траектории, которая образуется при сечении поверхности $\epsilon = \text{const}$ плоскостью, касающейся гиперболических точек изоэнергетической поверхности. Эти точки являются точками классической остановки при движении в однородном и постоянном магнитном поле. Период движения частицы логарифмически расходится при $p_H \rightarrow p_H^k$ (p_H^k — вектор в p -пространстве, проведенный в особую точку).

Сущность явления рассеяния легче всего пояснить на примере движения в слабо неоднородном постоянном во времени магнитном поле, имеющем прямую силовую линию. Пусть F — седловая точка изоэнергетической поверхности $\epsilon = \epsilon_0$, такая, что нормаль к поверхности в этой точке параллельна H_0 . Сечение $\epsilon = \epsilon_0$, $p_H = p_H^k$ есть «восьмерка», точка самопересечения которой совпадает с F . Если «токовый лепесток» при движении в p -пространстве коснется поверхности в седловой точке, то в дальнейшем он расщелится на два «токовых лепестка», соответствующих областям I и II, разделенным особой точкой (рис. 21). Режимы движения в этих областях существенно

*) В действительности вывод уравнений, описывающих медленное движение (дрейф и т. п.), связан с усреднением по интервалу времени T , удовлетворяющему неравенству $T_0 \ll T \ll \tau$, где T_0 — время прохождения частицы через элементарную ячейку, τ — время свободного пробега. Однако при усреднении ограниченных величин интегрирование можно распространить по всей траектории, так как разность

$$\lim_{T' \rightarrow \infty} \frac{1}{2T'} \int_{-T'}^{T'} f(t') dt' - \frac{1}{T} \int_t^{t+T} f(t') dt'$$

есть быстро осциллирующая функция порядка fT_0/T .

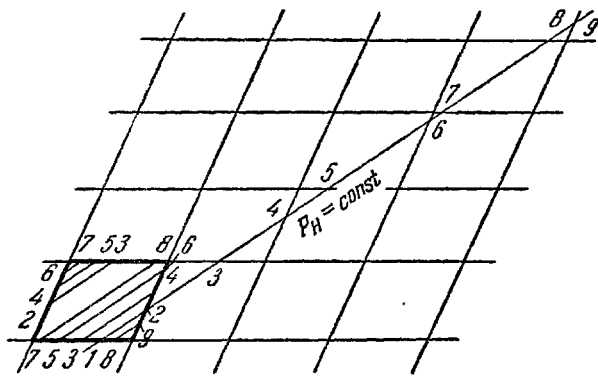


Рис. 20. Одна из кристаллографических плоскостей обратной решетки, пересеченная плоскостью $p_H = \text{const}$.

Одинаковыми цифрами обозначены эквивалентные точки

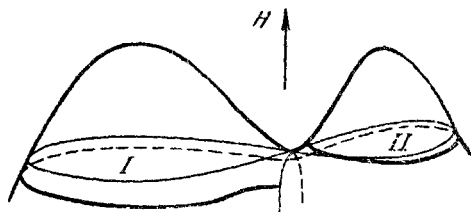


Рис. 21. Движение электрона в неоднородном магнитном поле вблизи седловой точки изоэнергетической поверхности (расщепление «токового лепестка»).

отличаются. В зависимости от точных («микроскопических») начальных условий частица попадает либо в область I , либо в область II . «Микроскопические» начальные условия перемежаются таким образом, что в каждом макроскопическом элементе энергетической поверхности, определенном усредненными значениями «координат», находятся точки, из которых частица попадает как в первую, так и во вторую область. С этой точки зрения можно рассматривать попадание частиц в каждую из областей как случайный процесс и говорить о своеобразном «рассеянии» частиц вблизи особой точки; при этом вероятности рассеяния в I и II (ω_1 и ω_2) имеют вполне определенные значения.

Для определения вероятностей рассеяния ω_1 и ω_2 рассмотрим классический ансамбль частиц, распределенных по некоторому прицельному параметру, выбор которого будет определен ниже. Каждая частица на последнем витке перед попаданием в области I и II пересекает главную линию кривизны, проходящую через точку I

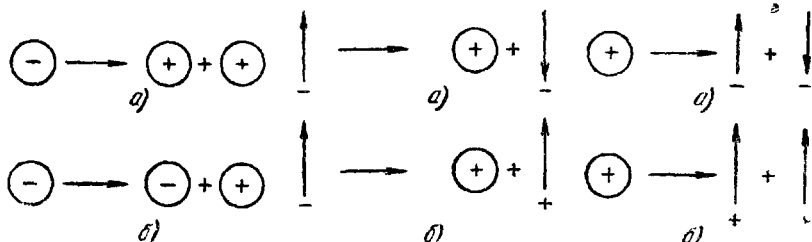


Рис. 22.

Рис. 23.

Рис. 24.

Типы переходов из одного режима движения к другому.

○ — движение по замкнутой траектории; ↑ — движение по открытой траектории (знаки объяснены в тексте).

($p_2=0$ на рис. 20) при некотором значении $p_H(0)$. Совершив полный оборот вокруг одной из петель «восьмерки», частица снова оказывается в окрестности точки самопересечения. В зависимости от знака разности $p_H(t) - f_H$ в этот момент времени частица попадает в область I или II , при этом величина $p_H(t) - f_H$ однозначно определяется значением $p_H(0)$ в начале оборота. Из сказанного видно, что величину $p_H(0)$, удобно взять в качестве прицельного параметра. Области I и II соответствуют элементам δ_1 и δ_2 значений $p_H(0)$, определяющих попадание в эти области. Вероятности рассеяния ω_1 и ω_2 , т. е. относительные числа частиц, попадающих соответственно в I и II , пропорциональны потокам частиц через δ_1 и δ_2 . Для достаточно плавной функции распределения эти потоки в первом приближении по неоднородности пропорциональны величинам самих элементов.

Интервалы δ_1 и δ_2 определяются с помощью соотношения

$$p_H(t) = p_H(0) + \int_0^t \dot{p}_H dt'.$$

Отсюда получим, что

$$\delta_1 = \int_0^{T_1} \dot{p}_H dt', \quad \delta_2 = \int_{T_1}^{T_2} \dot{p}_H dt'. \quad (11.4)$$

(Здесь T_1 — время движения вокруг первой петли «восьмерки», T_2 — время движения вокруг всей «восьмерки».)

Основной вклад в изменение p_H за время оборота вокруг «восьмерки» дают участки траектории, далекие от особой точки. Это объясняется тем, что в рассматриваемом случае в самой особой точке $\dot{p}_H = 0$.

Используя уравнение движения «токового лепестка», можно показать, что из выражений (11.4) следует ⁴⁵

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{\delta_1}{\delta_2} = \frac{S_1}{S_2}, \quad (11.5)$$

где S_1 и S_2 — площади петель «восьмерки». Из равенства (11.5) имеем

$$\omega_1 = \frac{S_1}{S_1 + S_2}, \quad \omega_2 = \frac{S_2}{S_1 + S_2}.$$

В общем случае существует несколько типов переходов от одного режима к другому. Возможные типы переходов условно изображены на рис. 22—24. В правых частях диаграмм 22—24 стоят символы, соответствующие двум областям, куда происходит рассеяние. На рисунках кружком символически изображена замкнутая траектория

тория; стрелка соответствует открытым периодическим траекториям, причем направление стрелки символизирует направление движения по периодическим траекториям. Соответствующие этим переходам типы изоэнергетических поверхностей представлены на рис. 25—27 с помощью линий $p_H = \text{const}$. Буквой F обозначена точка самопересечения. Жирная линия обозначает самопересекающуюся кривую. Стрелки указывают направление движения по траектории. Рис. 25 соответствует диаграммам 22, а и б; рис. 26 — диаграммам 23, а и 24, а; рис. 27 — диаграммам 23, б и 24, б. Знаки на диаграммах рис. 22—24 совпадают со знаком разности $p_H - f_H$ в областях с разными режимами движения*).

При движении в произвольном слабо неоднородном медленно меняющемся во времени электромагнитном поле вывод вероятностей того или иного режима движе-

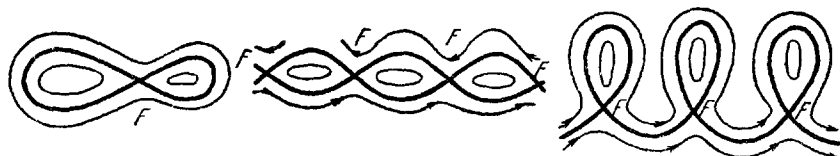


Рис. 25.

Рис. 26.

Рис. 27.

Типы изоэнергетических поверхностей, соответствующие переходам, изображенным на рис. 22—24.

ний несколько сложнее рассмотренного выше частного случая. В ⁴⁵ из общей формулы получены компактные выражения для соответствующих вероятностей в наиболее интересных частных случаях. Так, например, при движении в слабом электрическом поле, параллельном постоянному и однородному магнитному полю:

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \left| \frac{\frac{d}{dp_H} S_1(p_H, \epsilon_{кр}(p_H))}{\frac{d}{dp_H} S_2(p_H, \epsilon_{кр}(p_H))} \right|_{p_H = p_H^k}$$

3. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ КВАНТОВАНИЕ ВБЛИЗИ ОСОБЫХ КЛАССИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ

Как было показано в первой части обзора (см. § 3), период движения электрона по траектории с самопересечениями обращается логарифмически в бесконечность, так как точка самопересечения является точкой остановки.

Если не учитывать пересечения зон (см. § 1), то подобные траектории вида «восьмерок», по-видимому, особые траектории наиболее общего вида. На рис. 28 изобра-

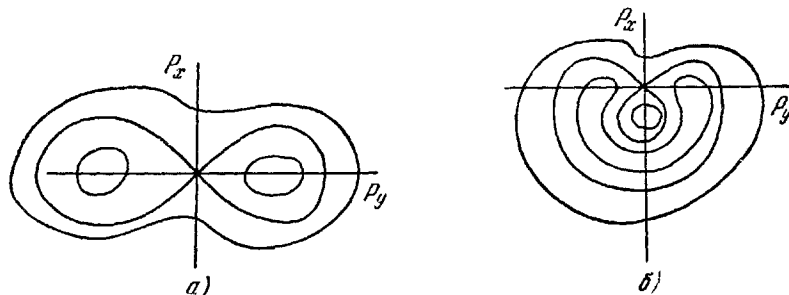


Рис. 28. Типичные особые траектории в магнитном поле вблизи точки самопересечения.

а) Изоэнергетическая поверхность имеет перемычку; б) изоэнергетическая поверхность имеет выемку.

жены типичные траектории в магнитном поле. Различным траекториям соответствуют различные значения p_z . Рис. 28, а изображает сечения изоэнергетической

*) Другие шесть типов перехода, принципиально не отличающихся от изображенных на рис. 22—24, получаются путем изменения их знака на противоположный

поверхности вблизи перемишки, рис. 28, б — вблизи вмятины. Особой траектории соответствует $p_z = p_{zk}$.

Квазиклассические уровни энергии с достаточной степенью точности (т. е. с точностью, необходимой для вычисления осциллирующих слагаемых термодинамического потенциала, см. § 6) могут быть получены из обычного условия «квантования площади» (§ 5 из 1). При отыскании уровней энергии, однако, надо учесть, что в точке $p_z = p_{zk}$ площадь S имеет особенность типа $\Delta p_z \ln \Delta p_z$, где $\Delta p_z = p - p_{zk}$. С одной стороны от $p_z = p_{zk}$ имеется две системы квазиклассических уровней*), определяемых уравнениями

$$S_1(\varepsilon, p_z) = \frac{ehH}{c} n_1, \quad S_2(\varepsilon, p_z) = \frac{ehH}{c} n_2. \quad (\text{II}, 6)$$

С другой стороны — одна система, определяемая уравнением

$$S(\varepsilon, p_z) = \frac{ehH}{c} n. \quad (\text{II}, 7)$$

«Перестройка» уровней происходит вблизи $p_z = p_{zk}$ и описывается системой уравнений

$$\begin{aligned} S_{1k} &= p_0 \Delta p_z \ln \left| \frac{\Delta p_z}{p_0} \right| = \frac{ehH}{c} n_1, \\ S_{2k} &= p_0 \Delta p_z \ln \left| \frac{\Delta p_z}{p_0} \right| = \frac{ehH}{c} n_2, \\ S_k &= p_0 \Delta p_z \ln \left| \frac{\Delta p_z}{p_0} \right| = \frac{ehH}{c} n, \quad S_k = S_{1k} + S_{2k}, \end{aligned} \quad (\text{II}, 8)$$

где $p_0 = 2V_z(p_{zk}) \sqrt{m_1 m_2}$. Обозначая

$$\frac{eS_{1k}}{ehH} = n_{1k}, \quad \frac{eS_{2k}}{ehH} = n_{2k}, \quad \frac{eS_k}{ehH} = n_k,$$

из уравнений (II, 8) имеем

$$\begin{aligned} \Delta p_z &= \frac{eHh}{cp_0} \frac{n_1 - n_{1k}}{\ln \frac{ehH}{cp_0} (n_1 - n_{1k})}, \\ \Delta p_z &= \frac{eHh}{cp_0} \frac{n_2 - n_{2k}}{\ln \frac{ehH}{cp_0} (n_2 - n_{2k})}, \\ \Delta p_z &= \frac{eHh}{cp_0} \frac{n - n_k}{\ln \frac{ehH}{cp_0} (n - n_k)}. \end{aligned} \quad (\text{II}, 9)$$

Интересно отметить, что вблизи $p_z = p_{zk}$ расстояния между уровнями существенно не эквивалентны, причем этот результат вытекает, как мы видели, из квазиклассических условий квантования. Уравнения (II, 8) применимы при n_{1k} , n_{2k} и $n_k \gg 1$, а решения (II, 9), конечно, только при n_{1k} , n_{2k} , $n_k \ll |n - n_{1k}|$, $|n - n_{2k}|$, $|n - n_k| \gg 1$. Строгий квантовомеханический анализ в квазиклассическом приближении движения электронов по восьмеричным траекториям, проведенный Зильберманом⁴⁶ и значительно более полно Лэбелем⁴⁷, приводит к аналогичным результатам.

Отметим еще, что уточнение квазиклассических уровней (типа учета $1/2$ в условиях квантования Бора) показывает, что имеет место любопытная осцилляторная зависимость расстояния между уровнями от магнитного поля (Лэбель⁴⁷).

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Л и ф ш и ц, М. И. К а г а н о в, УФН 69, 419 (1959).
2. Л. Д. Л а н д а у, ЖЭТФ 30, 1058 (1956).
3. А. Б. М и г д а л, В. Г а л и ц к и й, ЖЭТФ 34, 139 (1958).

*) Мы считаем для определенности энергию фиксированной, в этом случае квантуется p_z (p_{zk} — функция энергии). При фиксированном p_z , естественно, квантуется энергия ε . Особая траектория соответствует определенному критическому значению энергии $\varepsilon_k = \varepsilon_k(p_z)$.

- 4 Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, М., Гостехиздат, 1948, § 76.
5. W. A. Harrison, Phys. Rev. **118**, 1182, 1190 (1960).
6. F. Bloch, Zs. Phys. **52**, 555 (1928); **57**, 545 (1929).
7. W. A. Harrison, Phys. Rev. **118**, 1182 (1960).
8. F. G. Moliner, Phil. Mag. **3**, 207 (1958).
- 9 Г. Е. Зильберман, Я. Е. Айзенберг, Физ. метал. и металловед. **4**, 216 (1957).
10. И. Е. Алексеевский, Ю. П. Гайдук. И. М. Лифшиц, В. Г. Песчанский, ЖЭТФ **39**, 1201 (1960).
- 11 Г. Я. Любарский, Теория групп и ее применение в физике, М., Гостехиздат, 1957.
- 12 J. W. McClure, Phys. Rev. **108**, 612 (1957); Ph. Nozières, Phys. Rev. **109**, 1510 (1958).
13. А. А. Абрикосов, Л. А. Фальковский, ЖЭТФ **43**, 108 (1962)
14. J. M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960).
15. Ю. А. Бычков, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **41**, 1592 (1962).
16. Э. И. Рашба и В. И. Шюка, Физ. тв. тела **2**, 162 (1959).
17. E. W. Elcock, Roy. Soc. A **222**, 239 (1954); Г. Е. Зильберман, Ф. Ицкович, ЖЭТФ **32**, 158 (1957).
18. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **38**, 1569 (1960).
19. См., например, Ф. Блох. Молекулярная теория магнетизма, Харьков—Киев, 1934.
20. E. N. Adams, Phys. Rev. **89**, 633 (1953); М. В. Пидович, Физ. метал. и металловед. **7**, 641 (1959).
21. Р. Найерлс, Электронная теория металлов, М., ИЛ, 1947.
22. The Physics and Chemistry of Solids **23**, 433 (1962).
23. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ДАН СССР **96**, 963 (1954); И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ЖЭТФ **29**, 730 (1955).
24. Р. Курант, Д. Гильберт, Методы математической физики, т. 1, М.—Л., Гостехиздат, 1951, стр. 70.
25. М. Я. Азбель, ЖЭТФ **39**, 875 (1960).
26. М. И. Каганов, И. М. Лифшиц, К. Д. Синельников, ЖЭТФ **32**, 605 (1957).
27. Ю. А. Бычков, ЖЭТФ **39**, 1401 (1960).
28. R. B. Dingle, Proc. Roy. Soc. A **211**, 517 (1952).
29. M. H. Cohen, L. M. Falick, Phys. Rev. Letts. **7**, 231 (1961).
30. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **32**, 59 (1957).
31. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, ДАН СССР **91**, 795 (1953); А. М. Косевич, И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **29**, 743 (1955).
32. K. Fuchs, Proc. Camb. Phil. Soc. **34**, 100 (1938).
33. М. Я. Азбель, ЖЭТФ **34**, 754 (1958).
34. А. М. Косевич, ЖЭТФ **33**, 735 (1957).
35. А. М. Косевич, ЖЭТФ **35**, 738 (1958).
36. D. Shoenberg, Physica **19**, 791 (1953).
37. D. Shoenberg, Proc. Phys. Soc. **79** (1), 1 (1962).
38. В. Г. Барьяхтар, В. И. Макаров, ДАН СССР **149**, 64 (1962).
39. A. B. Pippard, Repts. Progr. Phys. **23**, 176 (1960).
40. И. М. Лифшиц, ЖЭТФ **26**, 551 (1954).
41. М. А. Кривоглаз, А. А. Смирнов, Физ. метал. и металловед **7**, 151 (1959).
42. И. М. Лифшиц, А. В. Погорелов, ДАН СССР **96**, 1143 (1954).
43. A. V. Gold, Phil. Trans. A **251**, 85 (1958); A. V. Gold, M. G. Priestley, Phil. Mag. **5**, 1089 (1960); E. M. Gunnerson, Phil. Trans. Roy. Soc. A **249**, 299 (1957).
44. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, Изв. АН СССР, сер. физ. **19**, 395 (1955).
45. И. М. Лифшиц, А. А. Слуцкий, В. М. Набатовский, ЖЭТФ **41**, 939 (1961).
46. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ **34**, 969 (1958).
47. М. Я. Азбель, ЖЭТФ **39**, 1276 (1960).
48. Б. И. Веркин, И. М. Дмитриенко, Изв. АН СССР **19**, 409 (1958).
49. R. G. Chambers, Proc. Phys. Soc. **78**, 911 (1961).
50. L. Van Hove, Phys. Rev. **103**, 849 (1957).