

*Н. Б. Брандт,
С. М. Чудинов*

ЭЛЕКТРОНЫ И ФОНОНЫ В МЕТАЛЛАХ

Издание второе,
переработанное и дополненное

Допущено Государственным комитетом СССР по
народному образованию в качестве учебного
пособия для студентов физических специальностей
высших учебных заведений

*ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКОВСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА
1990*

ББК 22.37
Б87
УДК 539.1

Рецензент:
кафедра низких температур Харьковского
государственного университета

Брандт Н. Б., Чудинов С. М.

Б87 Электроны и фононы в металлах: Учеб. пособие. — 2-е изд., перераб. и доп.—М.: Изд-во МГУ, 1990.—335 с.: ил. 206. ISBN 5—211—01088—4.

Учебное пособие (1-е изд. — 1980 г., вышло под заглавием «Энергетические спектры электронов и фононов в металлах») посвящено основным представлениям современной физики металлов. В основу книги положено выяснение связи между различными свойствами металлов и энергетическим спектром электронной и фононной систем. Рассматривается идеальная, не имеющая дефектов кристаллическая решетка, строится модель, описывающая возбужденные состояния системы (фононный спектр), а также взаимодействие двух систем. Изложение проводится без привлечения сложного математического аппарата современной физики твердого тела и нацелено на выяснение физической сущности явления.

Для студентов вузов, специализирующихся в области физики твердого тела.

Б 1604110000 (4309000000)—096 —96—90
077(02)—90

ББК 22.37

ISBN 5—211—01088—4

© Брандт Н. Б., Чудинов С. М.,
1990

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
Часть I. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА	9
Глава 1. Металл как ансамбль сильно взаимодействующих частиц	9
§ 1. Образование металла при конденсации нейтральных атомов. Металлическая связь	9
§ 2. Металлическая связь и кристаллическая решетка	12
§ 3. Общие замечания о характере колебаний атомов в кристаллической решетке	14
Глава 2. Колебания кристаллической решетки	19
§ 1. Статистика тепловых возбуждений в решетке	19
§ 2. Фононы	22
§ 3. Колебания одномерной цепочки	26
§ 4. Колебания цепочки атомов с двумя и тремя степенями свободы	37
§ 5. Изменение закона дисперсии колебаний цепочки атомов при учете взаимодействия с четырьмя ближайшими соседями	39
§ 6. Особенности распространения звуковых волн в трехмерных кристаллических решетках	42
Глава 3. Фононы	44
§ 1. Энергетический спектр фононов в кристаллах	44
§ 2. Спектральная плотность акустических фононов	51
§ 3. Особенности ван Хова	62
§ 4. Плотность состояний оптических фононов	66
§ 5. Квазилокальные колебания	68
§ 6. Температура Дебая	73
Глава 4. Теплоемкость решетки	75
§ 1. Энергия тепловых колебаний решетки	75
§ 2. Теория теплоемкости Дебая	77
§ 3. Модель Эйнштейна	79
Глава 5. Анггармонизм колебаний атомов в решетке	81
§ 1. Природа анггармонизма	81
§ 2. Тепловое расширение тел	82
§ 3. Взаимодействие фононов (фонон-фононное рассеяние)	85
Часть II. СИСТЕМА ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ	93
Глава 1. Электроны в кристаллической решетке	93
§ 1. Электроны в потенциальном ящике	93
§ 2. Электроны в металле как ферми-жидкость	97

§ 3. Поверхность Ферми	104
§ 4. Одноэлектронное приближение	105
§ 5. Электрон в поле периодического потенциала. Теорема Блоха	107
§ 6. Квазимпульс электрона в решетке	109
§ 7. Зоны Бриллюэна	112
§ 8. Экранированный потенциал ионов решетки. Метод псевдопотенциала	116
Глава 2. Поверхности Ферми металлов	122
§ 1. Зависимость энергии электрона в решетке от его импульса	122
§ 2. Построение зон Бриллюэна	131
§ 3. Обратная решетка. Метод Вигнера — Зейтца построения 1-й зоны Бриллюэна	139
§ 4. Заполнение электронами зоны Бриллюэна	143
§ 5. Поверхности Ферми элементов I группы периодической системы Менделеева	147
§ 6. Метод Харрисона построения поверхностей Ферми	150
§ 7. Общая схема построения поверхностей Ферми. Классификация топологии поверхностей Ферми	164
Глава 3. Динамика квазичастиц	169
§ 1. Движение электрона в кристаллической решетке. Эффективная масса	169
§ 2. Движение квазичастиц в постоянном магнитном поле	180
§ 3. Эффективная циклотронная масса квазичастицы	190
Глава 4. Рассеяние в электрон-фононной системе	200
§ 1. Общее представление о рассеянии электронов	200
§ 2. Рассеяние электронов на фононах	203
§ 3. Рассеяние электронов на точечных дефектах	208
§ 4. Особенности релаксации электронов при наличии двух каналов рассеяния: упругого и неупругого	215
§ 5. Интерференционные квантовые поправки к проводимости	218
§ 6. Влияние магнитного поля на интерференционные квантовые поправки	223
§ 7. Осцилляционные эффекты в магнитном поле в режиме квантовых поправок к проводимости	225
§ 8. Мезоскопика	227
Глава 5. Плотность электронных состояний	233
§ 1. Электронные системы с-квадратичным законом дисперсии	233
§ 2. Системы с произвольным законом дисперсии	236
§ 3. Электронная теплоемкость	241
§ 4. Перенормировка плотности состояний в результате взаимодействия электронов с решеткой	242
Глава 6. Квантование энергии электронов в магнитном поле	246
§ 1. Электрон в квантующем магнитном поле	246
§ 2. Распределение электронов в р-пространстве в присутствии квантующего магнитного поля	255
§ 3. Плотность электронных состояний в магнитном поле	262
§ 4. Изменение свободной энергии электронной системы в квантующем магнитном поле	275
§ 5. Магнитные поверхностные уровни	286
§ 6. Магнитный пробой	294
Глава 7. Фазовые электронные переходы в магнитном поле	304
§ 1. Двухзонный металл в магнитном поле	304
§ 2. Образование фазы экситонного диэлектрика при переходе «металл — диэлектрик» в двухзонном металле	320
Литература	333

ВВЕДЕНИЕ

Более 70 элементов периодической системы Менделеева — металлы. Вместе со сплавами они образуют огромное количество веществ с разнообразными свойствами. Металлы различаются по величине электропроводности, по своим оптическим, магнитным, гальвано- и термомагнитным характеристикам, обладают различной способностью излучать электроны при нагревании (горячая эмиссия) и под действием внешнего электрического поля (холодная эмиссия). Различны механические свойства металлов: твердость, упругие модули, ковкость, пластичность и т. д. Существенно разнятся температурные зависимости одних и тех же свойств разных металлов, причем эти различия особенно резко проявляются при низких температурах.

Однако, несмотря на такое разнообразие свойств, существуют общие характеристики, позволяющие описать практически все особенности металлов с единой точки зрения. Такими характеристиками являются энергетические спектры электронов и тепловых возбуждений кристаллической решетки — фононов в металле. Энергетический спектр — это зависимость энергии ϵ частиц от величины и направления их импульсов p : $\epsilon = \epsilon(p)$. Понятие об энергетическом спектре электронов и фононов составляет основу современной физики твердого тела.

Построение энергетического спектра электронов предполагает рассмотрение всех возможных энергетических состояний электронов в различных энергетических зонах. Для отдельной энергетической зоны зависимость энергии частиц от импульса $\epsilon_i = \epsilon_i(p)$ называется законом дисперсии (здесь i — номер зоны).

Удобным способом описания энергетического спектра является введение поверхности Ферми — наглядного геометрического образа, характеризующего свойства электронов проводимости и определяющего все возможные значения импульсов (по величине и направлению), которые имеют электроны в металле. Поверхность Ферми состоит из совокупности изоэнергетических поверхностей $\epsilon_i(p) = \text{const}$ в различных зонах и обычно имеет очень сложный вид.

В начале XX в. было установлено, что атомы в металле всегда частично ионизированы и высокая электропроводность металлов

связана с наличием «свободных» электронов. Поэтому перенос заряда может происходить под действием сколь угодно малого электрического поля.

Первая попытка объяснения электропроводности была предпринята Друде в 1900 г. Несколько позже идеи Друде получили развитие в трудах Лоренца. Согласно теории Друде — Лоренца, металл рассматривался в виде ящика, заполненного газом свободных электронов, подчиняющихся статистике Больцмана. С современной точки зрения эта модель неверна, так как она не смогла объяснить явления, в которых существенна природа носителей заряда и их конкретные свойства, например отсутствие сильного парамагнетизма и малое значение теплоемкости у коллективизированных электронов.

Дальнейшее развитие электронной теории металлов связано с работами Зоммерфельда (1926—1930 гг.). Он использовал такую же модель металла, как и в теории Друде — Лоренца, но учел квантовую природу электронов и применил для описания электронной системы статистику Ферми — Дирака. Таким образом, удалось объяснить отсутствие сильного парамагнетизма и большой теплоемкости у электронного газа. Однако оставалась не объяснена природа различия между металлами, полупроводниками и диэлектриками.

Существенным недостатком описанных теорий является то, что в них из рассмотрения была исключена кристаллическая решетка. Первые работы, в которых учитывалось взаимодействие электронов с решеткой, относятся к 30-м годам и связаны с именами Блоха и Бриллюэна. Они сыграли важную роль в формировании современных представлений об энергетическом спектре электронов. В них был установлен ряд фундаментальных понятий, относящихся к движению электронов в решетке (понятие квазимпульса, зон Бриллюэна и т. д.), значение которых сохранилось до настоящего времени.

К началу 50-х годов было накоплено большое число различных экспериментальных данных, которые не находили объяснения в рамках существовавших в то время теоретических представлений. Например, было обнаружено, что у очень чистых металлов зависимость электрического сопротивления от ориентации монокристаллических образцов в магнитном поле при низких температурах имеет чрезвычайно сложный вид. Исследования осцилляционных эффектов указывали на существование в металлах различных групп носителей тока, сильно отличающихся по своим свойствам. Оставалось непонятным, почему коллективизированные валентные электроны, которые, казалось бы, должны находиться в кристаллической решетке при одних и тех же условиях, распадаются на группы с различными физическими свойствами. Эти и многие другие проблемы получили разрешение в теории электронного энергетического спектра металлов, развитой за последние три десятилетия. Большой вклад в разработку этой теории был сделан советскими физиками И. М. Лиф-

шицем, А. А. Абрикосовым, В. Л. Гуревичем, М. И. Кагановым, А. М. Косевичем, В. Г. Песчанским. Разработка различных теоретических методов расчета электронных энергетических спектров и изучение особенностей поведения электронов в металлах с идеальной решеткой связаны также с именами Ч. Киттеля, Дж. Займана, У. Харрисона, А. Пиппарда, Г. Джонса, Д. Пайнса и др.

Наряду с успешным развитием представлений об электронной структуре металлов с идеальной кристаллической решеткой в семидесятые годы быстро начали накапливаться экспериментальные данные, относящиеся к аморфным металлам, к неупорядоченным металлам с малой длиной свободного пробега, к металлическим сплавам, к тонким металлическим пленкам и проводникам с малыми поперечными размерами и не укладывающиеся в рамки сложившихся ранее понятий.

К наиболее характерным явлениям, которые не могли быть объяснены на основе теории электронной структуры металла с идеальной решеткой, относятся:

- минимум сопротивления «грязного» металла (не содержащего, однако, магнитных примесей) при некоторой температуре и рост сопротивления при охлаждении до более низких температур;

- отрицательное магнетосопротивление, которое наиболее ярко проявляется у двумерных металлических систем;

- воспроизводимые флуктуации параметров (проводимости, магнетосопротивления и др.) у образцов малых размеров.

Потребовалось развить новые представления, связанные с нарушением идеальной решетки металлов. На этом пути были обнаружены локализация электронов, возникающая при некоторой степени неупорядоченности системы (так называемая андерсоновская локализация) и связанный с этим тип переходов металл — диэлектрик. В настоящее время происходит интенсивное изучение как самих переходов андерсоновского типа, так и поведения неупорядоченной системы с диэлектрической и металлической стороны перехода.

В 1980 году К. фон Клитцингом, Г. Дордой и М. Пеппером в двумерных металлических слоях было открыто явление, заключающееся в квантовании холловской компоненты магнетосопротивления. Было установлено, что квантовый эффект Холла присущ только неупорядоченной двумерной металлической системе и принципиально не может наблюдаться в металле с идеальной решеткой.

В настоящее время эффекты, связанные с неупорядоченностью решетки в металлах, являются предметом интенсивных исследований. К ним относятся эффекты слабой локализации и другие интерференционные явления в металлах, приводящие к квантовым поправкам в плотности электронных состояний и во всех термодинамических и кинетических характеристиках металлов, мезоскопические эффекты, эффекты, связанные с движением электронов в двумерном слое, находящихся на целиком заполненных

уровнях Ландау, эффекты вигнеровской кристаллизации в сильном магнитном поле при низких температурах и др. Отметим большой вклад советских ученых в изучение неупорядоченных систем. Пионерские работы в этой области были выполнены В. Л. Бонч-Бруевичем, А. Г. Ароновым, Б. Л. Альтшулером, Д. Е. Хмельницким, А. И. Ларкиным, А. Л. Эфросом, Б. И. Шкловским, Э. И. Рашбой, которые наряду с зарубежными учеными (Ф. Андерсоном, Н. Моттом, Т. Андо, Д. И. Таулессом, К. фон Клитцингом, Д. С. Тсуи и другими) заложили основы современных представлений о физике неупорядоченных и аморфных металлов.

По современным представлениям, металл можно рассматривать как совокупность системы положительно заряженных колеблющихся ионов, образующих квазипериодическую пространственную структуру (кристаллическую решетку), и системы относительно свободных коллективизированных валентных электронов, заполняющих решетку. Свойства каждого металла определяются валентностью z атомов, структурой их электронных оболочек, симметрией и особенностями структуры кристаллической решетки.

Теоретическое описание металла в рамках такой модели приводит к квантовомеханической задаче о системе $(N + zN)$ взаимодействующих между собой тел (N — число атомов в решетке), строгое решение которой в настоящее время невозможно. Однако, если не ставить перед собой задачу точного расчета энергетического спектра электронов в металлах, общее качественное представление о характере спектра электронов можно получить на основании более простой модели.

Упрощение исходной модели, которое будет проведено в дальнейшем, опирается на обширный экспериментальный материал, полученный при исследовании электронных свойств металлов в последние годы. Поэтому более простая модель, которая может быть получена таким путем, достаточно хорошо отражает свойства реальных металлов.

В книге принята следующая последовательность изложения.

1. Рассматривается идеальная (не имеющая дефектов) кристаллическая решетка и строится модель, описывающая возбужденные состояния системы.

2. Рассматривается система сильно взаимодействующих коллективизированных электронов и показывается, каким образом эта система может быть описана квазиидеальным газом заряженных элементарных возбуждений.

3. Рассматривается взаимодействие этих двух систем и строится энергетический спектр реальных металлов без магнитного поля и в квантующем магнитном поле.

4. Обсуждаются эффекты, к которым приводит неидеальность структуры кристаллической решетки металла.

ЧАСТЬ I

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

Глава 1

МЕТАЛЛ КАК АНСАМБЛЬ СИЛЬНО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

§ 1. ОБРАЗОВАНИЕ МЕТАЛЛА ПРИ КОНДЕНСАЦИИ НЕЙТРАЛЬНЫХ АТОМОВ. МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ

Для выяснения природы сил связи ионов в решетке металла рассмотрим процесс образования металла из газообразной фазы.

Пары металла, как и любые другие газы, при температуре, недостаточной для термической ионизации, состоят из электрически нейтральных атомов и электрической проводимостью не обладают. В то же время в твердом (или жидком) металле атомы ионизированы при любой температуре. Можно предположить, следовательно, что металлическая проводимость возникает в процессе сближения нейтральных атомов при некотором конкретном расстоянии между ними, независимо от агрегатного состояния вещества в этот момент. Это предположение экспериментально проверено И. К. Киконым в опытах по измерению электропроводности паров ртути под давлением.

Пары ртути изотермически сжимались при температуре выше критической. Увеличение давления в этом случае вызывало только взаимное сближение атомов, но не приводило к конденсации пара в жидкость или твердое тело. Выбранная температура, с другой стороны, была недостаточна для термической ионизации атомов, на что указывало отсутствие электропроводности газа при низком начальном давлении.

Появление металлической проводимости у паров ртути при сжатии наблюдалось только тогда, когда средние расстояния между атомами уменьшались практически до значения межионных расстояний в жидкой ртути и внешние электронные оболочки соседних атомов начинали перекрываться. Именно этот процесс приводит к обобществлению валентных электронов и образованию системы, состоящей из положительно заряженных атомных остовов и коллективизированных электронов. Таким образом, возникновение металлической проводимости при конденсации нейтральных атомов зависит от того, на каком среднем расстоянии будут находиться атомы в конденсированном состоянии.

Между достаточно удаленными электрически нейтральными атомами действуют силы притяжения, связанные с существованием у атомов флуктуирующих дипольных моментов. Природу возникновения этих сил можно пояснить следующим образом. Рассмотрим два атома. В каждый момент времени флуктуирующее электрическое поле, создаваемое одним из них, вызывает

поляризацию соседа, который при этом приобретает дипольный момент. Взаимодействие диполей приводит к возникновению сил притяжения между ними.

На расстояниях r , больших по сравнению с размерами диполя, электрическое поле E убывает по закону $E \sim 1/r^3$. Индуцированный этим полем дипольный момент p соседнего атома пропорционален E . Энергия U взаимодействия двух поляризованных атомов, равная энергии диполя в электрическом поле $-(pE)$, в свою очередь пропорциональна E^2 и убывает с расстоянием как $1/r^6$.

В результате эффекта поляризации возникают силы F притяжения между атомами $F = -\partial U / \partial r \sim 1/r^7$, которые носят название сил Ван-дер-Ваальса. Они являются причиной сближения нейтральных атомов и их конденсации в твердое тело, если тепловое движение не препятствует этому процессу.

При достаточно сильном сближении атомов их электронные оболочки начинают деформироваться, в результате чего возникают силы отталкивания, резко возрастающие при уменьшении r . Силы отталкивания объясняются принципом запрета Паули, согласно которому в системе одинаковых фермионов (электронов) две (или более) частицы не могут одновременно находиться в одном и том же состоянии. При перекрытии электронных оболочек появляется возможность электронам одного атома занимать состояния, уже занятые электронами другого атома, и наоборот. Перекрытие электронных оболочек возможно лишь при условии, что электроны переходят в свободные квантовые состояния с более высокой энергией. Это значит, что при перекрытии оболочек энергия системы увеличивается, в результате чего возникают силы отталкивания. Такие силы взаимодействия носят название обменных. Обменные силы более короткодействующие, чем силы Ван-дер-Ваальса. Они изменяются в первом приближении пропорционально $1/r^{12}$. При одинаковом расстоянии между атомами обменные силы возрастают по мере заполнения внешней электронной оболочки, так как при увеличении числа валентных электронов растет вероятность того, что несколько электронов в определенные моменты времени могут оказаться рядом.

Большая величина обменных сил, возникающих при сближении атомов благородных газов (He, Ne, Ar и т. д.), приводит к тому, что равновесие между силами Ван-дер-Ваальса и обменными силами возникает при столь малых деформациях электронных оболочек соседних атомов, при которых перекрытие между оболочками практически отсутствует и атомы остаются неионизированными. В результате кристаллы благородных газов являются идеальными диэлектриками. Зависимость энергии U взаимодействия атомов от расстояния r между ними в решетке таких веществ показана на рис. 1.

Равновесие между силами притяжения и отталкивания соответствует минимуму энергии U при $r=r_0$. У диэлектрика равновесное расстояние r_0 между атомами превосходит удвоенный ра-

диус $2R_1$ внешней электронной оболочки (если атомы рассматривать как сферы). Заметим, что сдвинуть равновесие в сторону меньших значений r_0 можно, если силы Ван-дер-Ваальса дополнить силами внешнего давления на вещество, как это было продемонстрировано в описанных выше опытах Кикоина.

Рассмотрим теперь случай, когда внешние электронные оболочки атомов не заполнены. Энергия взаимодействия атомов при их сближении теперь может не достигнуть минимума при $r \geq 2R_1$. Дальнейшее сближение приведет к возникновению перекрытия электронных оболочек и обобществлению валентных электронов.

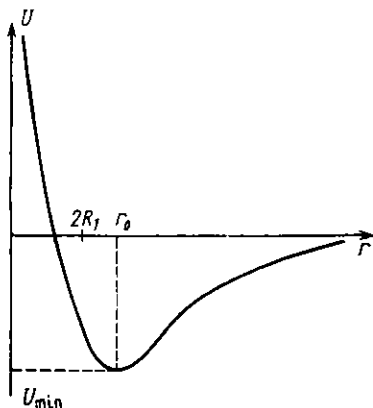


Рис. 1

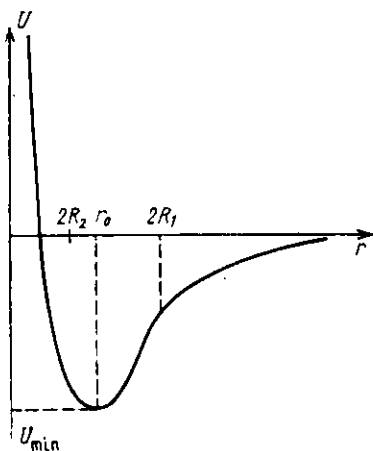


Рис. 2

Начиная с этого момента природа связи между атомами меняется, так как свободные электроны дают дополнительный вклад в силы притяжения. Электроны, находящиеся между положительно заряженными ионами, притягивают их к себе с силой большей, чем та, с которой эти ионы отталкиваются друг от друга, вследствие того, что расстояние между каждым ионом и электронами меньше, чем расстояние между ионами. Такой тип связи называется металлическим. Силы отталкивания между ионами теперь связаны с деформацией внутренних заполненных электронных оболочек ионов, имеющих средний радиус $R_2 < R_1$.

Образование металлической связи при $r \sim 2R_1$ приводит к изменению зависимости от r энергии U взаимодействия между атомами. Равновесное расстояние r_0 становится меньше, чем у диэлектрика, и расположено между значениями $2R_2$ и $2R_1$ (рис. 2).

Металлическая связь не имеет насыщения: к двум атомам может присоединиться третий, четвертый и т. д. Металл подобен гигантской молекуле, состоящей из системы положительно заряженных ионов, устойчивость которой обеспечивается существованием коллективизированных валентных электронов.

Устойчивость металлической связи по отношению к сильным смещениям ионов в решетке относительно друг друга объясняет способность металлов выдерживать большие пластические деформации, их ковкость. В отличие от металлов диэлектрики обычно хрупки, их механические свойства анизотропны. Жесткость же и хрупкость отдельных металлов или сплавов объясняются тем, что их решетки сильно искажены присутствием примесей и большого числа различного рода дефектов (вакансий, дислокаций и т. п.). Чистые совершенные монокристаллы металлов мягки и пластичны.

Если металл сжимать, то при достаточно высоких давлениях образуется перекрытие внутренних электронных оболочек, которое приводит к обобществлению находящихся на них электронов. Аналогично этому сильное сжатие диэлектрических кристаллов должно вызвать образование металлической связи между атомами и переход в металлическое состояние. Таким образом, при сжатии любого вещества должно происходить последовательное обобществление (коллективизация) электронов, расположенных на все более глубоких внутренних оболочках атомов. Очевидно, при этом объем вещества должен каждый раз скачкообразно уменьшаться. В пределе сверхвысоких давлений все вещества при температурах ниже критической должны перейти в состояние «идеального» металла, решетка которого состоит из атомных ядер и заполнена коллективизированными электронами.

Любопытно отметить, что при образовании металлической связи под давлением энергия притяжения значительно возрастает, и это в некоторых случаях приводит к образованию локального минимума на кривой $U(r)$ при значении r , меньшем расстояния r_0 , соответствующего обычным условиям равновесия. При этом возникающая металлическая фаза может оказаться устойчивой при снятии давления. Такая ситуация ожидается, например, при сжатии атомарного или молекулярного водорода. Теоретические оценки показывают, что атомарный водород под давлением в несколько миллионов атмосфер должен перейти в металлическую фазу, которая сохранится в метастабильном состоянии при последующем снижении давления (давление, соответствующее переходу в металлическую фазу, для атомарного водорода, по грубым оценкам, составляет 2—4 млн атмосфер).

§ 2. МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ РЕШЕТКА

Силы металлической связи по своей природе (во всяком случае для сферической модели атомов) изотропны. Из этого следует, что ионные остовы в решетке металла должны быть расположены так, как располагаются твердые шары под действием внешнего давления, т. е. в наиболее плотной упаковке.

Упаковка шаров тем плотнее, чем больший объем $V_{ш}$ они занимают во всем объеме решетки V . Плотность упаковки можно

характеризовать отношением $V_{\text{ш}}/V$, а также числом ближайших соседних атомов (шаров), окружающих какой-либо атом (шар) в решетке. Число ближайших соседей называется координационным числом Z .

Для простой кубической (ПК) решетки координационное число Z , очевидно, равно 6. Нетрудно показать, что отношение $V_{\text{ш}}/V$ при этом составляет $\pi/6 \approx 0,523$. В ОЦК-решетке $Z=8$ и $V_{\text{ш}}/V = \sqrt{3}\pi/8 \approx 0,681$ (рис. 3).

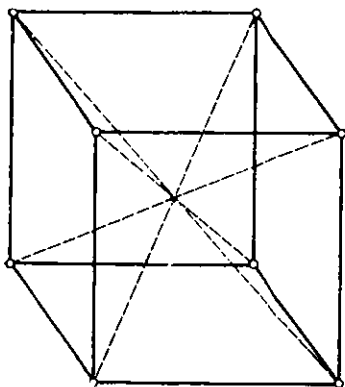


Рис. 3

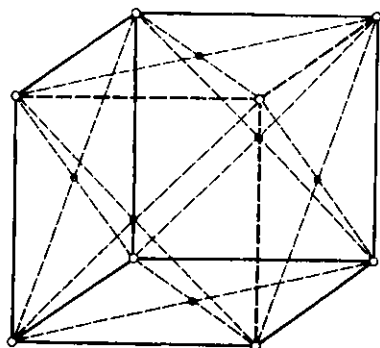


Рис. 4

Максимальная плотность упаковки соответствует $Z=12$ и отношению $V_{\text{ш}}/V = \sqrt{2}\pi/6 \approx 0,740$. Такая плотность упаковки достигается в гранецентрированной кубической (ГЦК) (рис. 4) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетках. ГПУ-решетка состоит из трехгранных призм, высота c которых относится к стороне a равностороннего треугольника в основании призмы, как $c/a = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$.

Атомы расположены в вершинах призм, а также в центрах трех из шести призм, расположенных симметрично относительно гексагональной оси (рис. 5).

ГЦК- и ГПУ-решетки, очевидно, наилучшим образом соответствуют характеру металлической связи. Однако наиболее плотная упаковка атомов в металлах может осуществляться только при достаточно слабом возмущающем воздействии тепловых колебаний

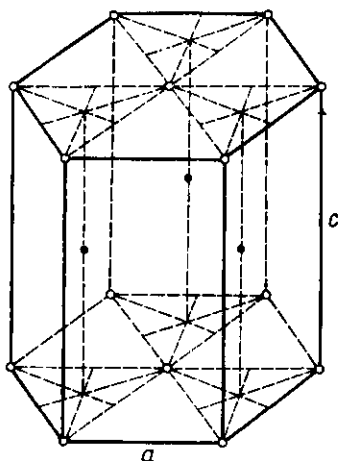


Рис. 5

и при отсутствии в веществе других типов связи, кроме металлической (например, ковалентной). При температурах, отличных от нуля, когда амплитуда тепловых колебаний атомов становится достаточно большой, а также если к металлической примешиваются другие типы связи, могут реализоваться структуры с менее плотной упаковкой. Например, щелочные металлы Li, Na, K с чисто металлической связью при комнатной температуре кристаллизуются в ОЦК-структуру. Однако, как и следует из рассматриваемой модели, эти металлы при охлаждении испытывают фазовые полиморфные превращения, при которых ОЦК-решетка перестраивается в ГЦК-решетку.

§ 3. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ О ХАРАКТЕРЕ КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Кристалл представляет собой совокупность атомов, связанных упругими силами. Сильная зависимость сил взаимодействия от расстояния между атомами приводит к тому, что колебания атомов в решетке в общем случае не являются гармоническими. Гармоническое приближение справедливо лишь при малых амплитудах смещения атомов. Характерной особенностью колебаний любого ансамбля взаимодействующих элементов является то, что частотный спектр ансамбля определяется всей системой в целом. Поэтому кристалл, являющийся сложной колебательной системой со многими степенями свободы, нельзя рассматривать как совокупность независимых осцилляторов, колеблющихся с одной и той же собственной частотой.

В качестве примера ансамбля взаимодействующих элементов можно рассмотреть систему из N колебательных радиочастотных контуров с одинаковыми собственными частотами, равными ω_0 .

Если контуры находятся на достаточно большом расстоянии друг от друга, так что их индуктивным взаимодействием можно пренебречь, частотный спектр ансамбля описывается одной частотой ω_0 .

При сближении контуров между ними возникает индуктивное взаимодействие, в результате которого частотный спектр расщепляется на совокупность частот, расположенных в некотором частотном интервале, ширина которого определяется степенью связанности и увеличивается при уменьшении расстояния между контурами. Число частот в спектре равняется числу N взаимодействующих контуров. При увеличении числа контуров расстояние между граничными частотами спектра (ширина спектра по частоте) слабо возрастает, а интервалы между отдельными частотами сужаются. В результате этого при $N \rightarrow \infty$ спектр становится квазинепрерывным: расстояния между частотами становятся пренебрежимо малыми по сравнению с шириной спектра. Частота ω_0 расположена внутри интервала разрешенных частот ближе к его правой границе.

В рассмотренном случае каждый элемент ансамбля являлся колебательной системой и при отсутствии взаимодействия, что не позволяет провести полную аналогию между ними и ансамблем атомов в кристаллической решетке. Дело в том, что в решетке без учета взаимодействия каждый атом не является колебательной системой. Колебательный спектр ансамбля атомов возникает только при учете упругого взаимодействия между ними. Частоты колебаний кристаллической решетки как системы со многими степенями свободы и энергия связи между атомами определяются одними и теми же упругими постоянными. Огромное число атомов в кристаллической решетке приводит к тому, что спектр ее колебаний является квазинепрерывным в интервале частот от $\omega_{\min}$ до $\omega_{\max}$. Величина $\omega_{\min}$ определяет расстояние между квазидискретными частотами. Так как число разрешенных частот в кристалле равняется числу степеней свободы ($3N_{\text{ат}}$, где $N_{\text{ат}}$ — число атомов в кристалле), $\omega_{\min}$ пренебрежимо мало по сравнению с $\omega_{\max}$ и поэтому можно считать, что частотный спектр кристалла начинается практически с нулевой частоты.

Из сказанного следует, что вообще нельзя говорить о какой-то определенной частоте колебания отдельных атомов в решетке. Тем не менее в отдельных случаях бывает удобно ввести условную частоту ω_0^* , эквивалентную по своему смыслу собственной частоте в рассмотренном выше примере колебания ансамбля радиочастотных контуров. Такую частоту можно ввести, рассматривая колебания отдельного атома в решетке при жестко фиксированных положениях всех остальных атомов. Найденная таким образом частота ω_0^* расположена внутри интервала разрешенных частот ближе к правой границе спектра, т. е. по порядку величины ω_0^* близка к $\omega_{\max}$.

Обратим внимание на следующее. Спектр колебаний каждого атома формируется, как указывалось, ансамблем в целом. Поэтому изменение числа атомов в ансамбле изменяет значение всех частот в спектре, не меняя практически значения $\omega_{\max}$. Однако в связи с тем, что расстояния $\sim \omega_{\min}$ между разрешенными частотами ничтожно малы, общие свойства спектра при этом не меняются.

Таким образом, решетку в целом нельзя рассматривать как совокупность независимых осцилляторов, колеблющихся с собственной частотой. Наличие взаимодействия между атомами приводит к тому, что спектр кристалла является квазинепрерывным и состоит из большого числа дискретных частот ω_q , расположенных в широком интервале — практически от 0 до $\omega_{\max}$.

Для большинства твердых тел $\omega_{\max}$ по порядку величины составляет 10^{13} Гц, в то время как $\omega_{\min}$ зависит от числа атомов в решетке (от размера тел) и для кристаллов объемом ~ 1 см³ составляет $\sim 10^5$ Гц. Каждое колебание с частотой ω_q является одним из нормальных колебаний в решетке, которому соответствует стоячая волна с длиной волны λ_q . Известно, что в однородной упругой среде длина стоячей волны λ обратно пропорцио-

нальна соответствующей частоте колебаний. Это легко проиллюстрировать, рассматривая стоячие волны в струне длиной L с закрепленными концами. Основному тону колебаний струны (минимальной частоте) соответствует стоячая волна $\lambda_{\max}=2L$. Более высоким частотам соответствуют волны с длиной $2L/2, 2L/3, \dots$. Так как все атомы в решетке идентичны, спектр колебаний решетки в целом должен совпадать со спектром колебаний отдельного атома. В связи с этим колебания каждого атома являются суперпозицией гармонических (в первом приближении) колебаний с частотами ω_q , определяемыми частотным спектром всего кристалла, или суперпозицией нормальных колебаний с различными длинами волн. Каждую гармоническую составляющую колебаний атомов с частотой ω_q можно рассматривать в первом приближении как гармонический осциллятор, энергия которого выражается известной формулой

$$\epsilon_n^q = \hbar \omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right).$$

Квантовое число n_q может принимать любые целые значения 0, 1, 2, 3, ... и т. д.

Как видно из приведенной формулы, энергия осциллятора состоит из двух частей: энергии нулевых колебаний $\epsilon_0^q = \hbar \omega_q / 2$ ($n=0$) и энергии $n_q \hbar \omega_q$, характеризующей возбужденное состояние осциллятора.

Энергия ϵ_0^q определяет амплитуду Δx_0^q нулевых колебаний атома на частоте ω_q .

Нулевые колебания являются следствием соотношения неопределенностей Гейзенберга для координаты x и импульса p частицы: $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ ($\hbar = 2\pi \hbar = 6,62 \cdot 10^{-27}$ эрг·с — постоянная Планка). Это соотношение означает, что квантовая частица не может находиться в покое ($p=0, \Delta p=0$) в определенном месте пространства ($\Delta x=0$). Локализация частицы ($\Delta x \rightarrow 0$) приводит к росту неопределенности ее импульса Δp и кинетической энергии $\left(\frac{\Delta p}{2m} \right)^2$ и является энергетически невыгодной.

Амплитуду Δx_0^q нулевых колебаний легко определить, используя принцип соответствия между квантовомеханическими и классическими выражениями для одних и тех же величин:

$$\epsilon_0^q = \frac{\hbar \omega_q}{2} = \frac{1}{2} m \omega_q^2 (\Delta x_0^q)^2, \text{ откуда } \Delta x_0^q = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega_q}}.$$

Неопределенность Δx_0^q в положении атомов относительно друг друга связана с нулевыми колебаниями с максимальной частотой $\omega_{\max}$ и минимальной длиной волны $\lambda_{\min}=2a$, при которых соседние атомы колеблются в противофазе. Поскольку Δx_0^q определяет размер области пространственной локализации атомов, свойства кристаллической решетки в значительной степени должны зави-

сеть от величины отношения $\Delta x_0'/a$ амплитуды нулевых колебаний к среднему расстоянию между атомами. При $\Delta x_0'/a \ll 1$ вероятность перескока атомов из занимаемых ими положений в соседние (вероятность делокализации) мала и решетку можно рассматривать как квазиклассический объект. Если же $\Delta x_0'/a \sim 1$, то квазиклассическое приближение неприменимо, так как существует значительная вероятность квантовых переходов атомов из одного узла решетки в другой. При этом вообще нельзя говорить о локализации атомов вблизи определенных точек координатного пространства. Такие кристаллы, в которых атомы с большой вероятностью делокализованы и могут перемещаться в решетке, получили название квантовых кристаллов. Заметим, что принятый в настоящее время термин «квантовый кристалл» употребляется в том случае, когда в перемещении атомов главную роль играет туннельный, а не надбарьерный переход атомов из одного положения в другое.

Если в квантовых кристаллах при $T=0$ К увеличить амплитуду нулевых колебаний настолько, чтобы отношение $\Delta x_0'/a$ стало больше единицы (например, уменьшая упругую постоянную β путем всестороннего растяжения кристалла), то в результате этого может произойти квантовое (при $T=0$ К!) плавление и образование квантовой жидкости.

Примером квантовой жидкости, существующей при нормальном давлении, является жидкий гелий, который не замерзает при понижении температуры до абсолютного нуля (квантовыми жидкостями являются как He^4 , так и его изотоп He^3).

При всестороннем сжатии жидкого гелия коэффициент β увеличивается и происходит обратный переход: квантовая жидкость замерзает и образуется квантовый кристалл (для He^4 и He^3 в твердом состоянии значения $\Delta x_0'/a$ близки к единице).

Интересно отметить, что у твердого водорода $\Delta x_0'/a \simeq 0,77$, так что степень «квантовости» у кристалла водорода существенно меньше, чем у гелия. Однако если бы удалось кристалл водорода растянуть всесторонним образом, то водород должен был бы стать квантовым кристаллом, а затем при дальнейшем растяжении расплавиться и перейти в квантовую жидкость.

У обычных твердых тел (металлов, полупроводников или диэлектриков) амплитуда нулевых колебаний значительно меньше межатомных расстояний. Вероятность делокализации атомов при этом пренебрежимо мала, так что каждый атом можно рассматривать локализованным в определенной области пространства, малой по сравнению с объемом элементарной ячейки.

Рассмотрим теперь часть энергии $n_q \hbar \omega_q$, описывающую возбужденное состояние осцилляторов. Число n_q возбужденных квантов энергии $\hbar \omega_q$ зависит от величины возбуждающей энергии, например тепловой. Всякий раз, когда температура изменяется на величину $\Delta T \sim \frac{\hbar \omega_q}{k}$, амплитуда колебаний с частотой

ω_q возрастает на величину Δx_q , пропорциональную $\sqrt{2\hbar/m\omega_q}$, и энергия ω_q -го колебания увеличивается на $\hbar\omega_q$. Очевидно, что при данной температуре число возбужденных квантов энергии будет максимально у наиболее низкочастотных колебаний. Это число убывает при увеличении ω_q .

Заметим, что величина одного кванта энергии $\hbar\omega_q$, т. е. минимальная величина энергии, необходимая для возбуждения наиболее высокочастотных колебаний в решетке, не является малой величиной. Сравнивая $\hbar\omega_{\max}$ с энергией классического осциллятора при некоторой температуре T^* : $\hbar\omega_{\max} = kT$ ($\hbar = 1,058 \cdot 10^{-27}$ эрг·с, $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$ эрг/град, $\omega_{\max} \approx 10^{13}$ Гц), находим, что $T^* \approx 100$ К.

Общая картина энергетического спектра колебаний кристалла, определяемого формулой $\epsilon_n^q = \hbar\omega_q \left(n_q + \frac{1}{2} \right)$, изображена на рис. 6. Вертикальные прямые соответствуют разрешенным значениям частот ω_q . Число таких частот $\sim \omega_{\max}/\omega_{\min}$ в действительности очень велико, поэтому для наглядности приведены только некоторые из них. Разрешенные значения энергии задаются точками пересечения вертикальных прямых с семейством наклонных прямых, соответствующих различным номерам n_q в формуле для энергии ϵ_n^q . Расстояние между соседними точками на вертикальных прямых $\omega = \omega_q$ равно кванту энергии $\hbar\omega_q$.

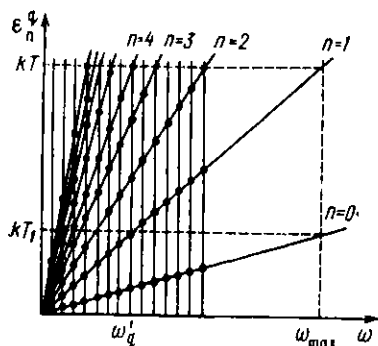


Рис. 6

ми на прямой с $n=0$. Строго говоря, для описания нулевых колебаний нельзя использовать классические аналогии. Поэтому представление их в виде сложного колебательного движения, являющегося суперпозицией гармонических колебаний с частотами ω_q

и с амплитудами $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_q}}$, весьма условно.

Нулевые колебания не несут тепловой энергии и в первом приближении не меняются при изменении температуры (в следующем приближении частоты ω_q меняются в результате изменения силовых постоянных при тепловом расширении решетки).

При повышении температуры в первую очередь возбуждаются низкочастотные колебания. Так как минимальная частота $\omega_{\min}$ у кристалла размерами ~ 1 см составляет $\sim 10^5$ Гц и приблизительно на восемь порядков меньше $\omega_{\max}$ ($\hbar\omega_{\max}/k \sim 100$ К), квант

энергии $\hbar\omega_{\min}$ равен $\sim k \cdot 10^{-6}$, т. е. возбуждается уже при температуре 10^{-6} К.

Таким образом, число возбужденных низкочастотных квантов весьма велико даже при температурах много ниже 1 К. Возбужденным при температуре T квантам энергии соответствуют точки, расположенные ниже горизонтальной прямой $\epsilon = kT$ на рис. 6. Например, при температурах ниже T_1 возбуждаются колебания с частотами $\omega_q < \omega_q'$, а более высокочастотные колебания в спектре практически отсутствуют. При дальнейшем повышении температуры возбуждаются колебания с более высокими частотами и одновременно растет число квантов низкочастотных колебаний. Из рис. 6 следует, что существует некоторая характерная температура $T = T^*$, при которой возбуждаются колебания со всеми возможными частотами от $\omega_{\min}$ до $\omega_{\max}$. Дальнейшее повышение температуры приводит только к увеличению амплитуды колебаний (числа возбужденных квантов) с каждой частотой ω_q .

Глава 2

КОЛЕБАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

§ 1. СТАТИСТИКА ТЕПЛОВЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В РЕШЕТКЕ

Рассмотрим теперь более строго процесс возбуждения колебаний атомов в решетке при повышении температуры.

Согласно распределению Гиббса вероятность ω_{n_q} того, что при температуре T осциллятор с собственной частотой ω_q находится в некотором квантовом состоянии n_q с энергией ϵ_n^q , равна

$$\omega_{n_q} = A_q e^{-\frac{\epsilon_n^q}{kT}}. \quad (2.1)$$

Нормировочная постоянная A_q находится из условия $\sum_{n_q=0}^{\infty} \omega_{n_q} = 1$,

откуда, суммируя по n_q бесконечно убывающую геометрическую

прогрессию со знаменателем $e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}}$ ($\epsilon_n^q = \hbar\omega_q(n_q + 1/2)$), получаем

$$A_q = \left[\sum_{n_q=0}^{\infty} e^{-\frac{\epsilon_n^q}{kT}} \right]^{-1} = e^{\frac{\hbar\omega_q}{2kT}} (1 - e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}}). \quad (2.2)$$

Таким образом, выражение для ω_n^q имеет вид

$$\omega_{n_q} = \left(1 - e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}}\right) e^{-\frac{n_q\hbar\omega_q}{kT}}. \quad (2.3)$$

Среднее число $\bar{n}_q$ возбужденных квантов $\hbar\omega_q$ при температуре T равно

$$\bar{n}_q = \sum_{n_q=0}^{\infty} n_q \omega_{n_q}. \quad (2.4)$$

Для вычисления суммы в (2.4) обозначим $\hbar\omega_q/kT = x$. При этом

$$\sum_{n_q=0}^{\infty} n_q e^{-\frac{n_q\hbar\omega_q}{kT}} = \sum_{n_q=0}^{\infty} n_q e^{-n_q x} = -\frac{d}{dx} \sum_{n_q=0}^{\infty} e^{-n_q x} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}.$$

Таким образом,

$$\bar{n}_q = (1 - e^{-x}) \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} = \frac{e^{-x}}{e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}} - 1}. \quad (2.5)$$

Аналогично средняя энергия $\bar{\epsilon}_q$ возбуждения осциллятора на частоте ω_q при температуре T равна

$$\bar{\epsilon}_q = \sum_{n_q=0}^{\infty} \epsilon_{n_q}^q \omega_{n_q} = \frac{\hbar\omega_q}{2} + \hbar\omega_q \sum_{n_q=0}^{\infty} n_q \omega_{n_q},$$

откуда согласно (2.4) и (2.5)

$$\bar{\epsilon}_q = \frac{\hbar\omega_q}{2} + \bar{n}_q \hbar\omega_q = \frac{\hbar\omega_q}{2} + \frac{\hbar\omega_q}{e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}} - 1}. \quad (2.6)$$

Первое и второе слагаемые в (2.6) представляют собой энергию нулевых колебаний и среднюю энергию $\bar{u}_q$ тепловых колебаний осциллятора. При низких температурах $T \ll \hbar\omega_q/k$ величины $\bar{n}_q$ и $\bar{u}_q = \bar{\epsilon}_q - \frac{1}{2} \hbar\omega_q$ экспоненциально малы:

$$\bar{n}_q \simeq e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}}, \quad \bar{u}_q \simeq \hbar\omega_q e^{-\frac{\hbar\omega_q}{kT}}. \quad (2.7)$$

При высоких температурах $T > \hbar\omega_q/k$ обе эти величины возрастают пропорционально T :

$$\bar{n}_q \simeq \frac{kT}{\hbar\omega_q}, \quad \bar{u}_q \simeq kT. \quad (2.8)$$

Из выражения (2.3) следует, что при температуре $T^* = \hbar\omega_{\max}/k$ вероятность возбуждения одного кванта ($n_{q\max} = 1$) энергии

$\hbar\omega_{\max}$ у осциллятора равна 0,232, двух квантов — 0,086, трех квантов — 0,032 и т. д.

Напомним, что каждый атом в решетке совершает одновременно колебания со всеми частотами ω_q , возбужденными при данной температуре. Это означает, что при температуре T^* (для большинства твердых тел эта температура близка к комнатной) на первом возбужденном уровне с частотой $\omega_{\max}$ ($n_{q_{\max}}=1$, $\varepsilon_1 = \frac{\hbar\omega_{\max}}{2} + \hbar\omega_{\max}$) находится лишь 23% атомов, на втором ($n_{q_{\max}}=2$; $\varepsilon_2 = \frac{\hbar\omega_{\max}}{2} + 2\hbar\omega_{\max}$) — 8,6%, на третьем ($n_{q_{\max}}=3$; $\varepsilon_3 = \frac{\hbar\omega_{\max}}{2} + 3\hbar\omega_{\max}$) — 3,2% атомов и т. д. Таким образом, при температуре T^* значительная часть атомов не возбуждена на частоте $\omega_{\max}$ и совершает только нулевые колебания на этой частоте.

Число атомов, возбужденных на первый энергетический уровень на частоте $\omega_{\max}$, экспоненциально быстро убывает при понижении температуры. Так, при $T=T^*/2$ оно составляет около 12%, а при $T=T^*/3$ — около 5% от общего числа атомов в решетке. При температуре $T=T^*/50$ (которая составляет несколько градусов Кельвина) число атомов, возбужденных на первый уровень, равно $Ne^{-50} \simeq N \cdot 10^{-20}$, т. е. в решетке практически отсутствуют атомы, возбужденные на частоте $\omega_{\max}$. Это означает, что T^* можно рассматривать как некоторую характерную температуру, разделяющую шкалу температур на две области: низкотемпературную, где возбуждены не все частоты спектра колебаний, и высокотемпературную, где возбуждены все частоты. При увеличении температуры выше T^* число возбуждений с частотой $\omega_{\max}$ быстро возрастает, так что при $T \simeq 1,4 T^*$ возбуждаются колебания с частотой $\omega_{\max}$ практически у всех атомов решетки.

Введенная таким образом температура T^* называется температурой Дебая и обычно обозначается θ_D .

Из проведенного выше рассмотрения следует, что переход от низкотемпературной области к высокотемпературной области не является резким и использованная выше процедура определения величины параметра θ_D в известной мере условна. Поэтому реальное различие в характере колебаний решетки проявляется лишь при переходе из области температур $T \ll \theta_D$ к области $T > \theta_D$.

Несмотря на то что θ_D не может быть определена в общем случае точно, она является весьма удобным физическим параметром и входит в выражения для многих интегральных характеристик твердого тела, таких, например, как теплоемкость, теплопроводность и т. д. Температура Дебая данного вещества зависит от энергии связи $U_{\text{св}}$ атомов, а значит, и от температуры плавления $T_{\text{пл}}$. Количественно связь θ_D с $T_{\text{пл}}$ устанавливается эмпирической формулой Линдемана

$$\theta_D \simeq BT_{\text{пл}}^{1/2} \tilde{A}^{-5/6} D_0^{1/3}, \quad (2.9)$$

где $\bar{A}$ — средний атомный вес, г; D_0 — плотность вещества, г/см³; B — постоянный коэффициент. Значение B , найденное эмпирически, близко к 120.

Покажем на двух примерах важность знания параметра θ_D .

1. Температура Дебая определяет температуру, при которой следует проводить отжиг монокристаллов для снятия напряжений в решетке. Отжиг при температурах, близких к $T_{пл}$, не улучшает, а, наоборот, ухудшает решетку кристалла, так как приводит к появлению вакансий, внедрений и т. д. С другой стороны, отжиг при $T < \theta_D$ малоэффективен, ибо при этих температурах энергия связи настолько велика по сравнению с kT , что тепловые колебания не могут привести к снятию локальных напряжений и искажений решетки. Наиболее эффективной температурой отжига является температура $T \geq \theta_D$. Например, для меди, для которой $\theta_D = 315$ К, отжиг вполне эффективен уже при температуре около 500 К (230°C). Выдержанная в течение нескольких дней при такой температуре медь становится очень мягкой ($T_{пл}$ меди составляет 1083°C).

2. Температура Дебая определяет вероятность сохранения в метастабильном состоянии той или иной фазы твердого тела при понижении температуры (закалке).

Рассмотрим вещество, в котором при температурах $T_1 < T_2 < T_3$ и т. д. последовательно происходят фазовые переходы из одной кристаллической модификации в другую. В областях температур $T < T_1$, $T_1 < T < T_2$, $T_2 < T < T_3$ и т. д. равновесному состоянию решетки соответствуют фазы 1, 2, 3 и т. д. Примерами различных фаз одного вещества могут служить белое и серое олово, α -, β - и γ -модификации железа и т. п.

Энергия тепловых колебаний при температуре выше температуры Дебая θ_D достаточна для приведения решетки в равновесное состояние. Следовательно, сохранить, например, фазу 2 в метастабильном состоянии при понижении температуры очень просто, если переход из фазы 2 в фазу 1 при температуре T_1 происходит ниже температуры Дебая θ_D фазы 2. При обратном соотношении $\theta_D < T_1$ сохранить фазу 2 в метастабильном состоянии можно лишь в результате очень быстрого охлаждения. При этом чем меньше θ_D , по сравнению с T_1 , тем меньше вероятность сохранения фазы 2.

§ 2. ФОНЫ

Существуют два практически эквивалентных метода описания колебаний решетки. Один из них, как указывалось выше, основан на представлении о нормальных колебаниях системы, а другой — на представлении о совокупности бегущих волн.

Первый метод базируется на предположении о том, что совокупность нормальных колебаний, которые существуют в кристалле, адекватно описывает набор частот ω_q , характеризующий ансамбль взаимодействующих атомов в решетке. Иначе, это пред-

положение означает, что набор нормальных колебаний, которые могут существовать в данном твердом теле как целом, описывает реально существующее мгновенное расположение атомов, совершающих сложные колебательные движения.

На рис. 7 изображены основная мода, а также 2-я и 3-я гармоника нормальных колебаний упругой цепочки атомов (струны) длины L с закрепленными концами.

Как уже указывалось, нормальные колебания можно рассматривать в качестве установившихся в данном теле стоячих волн. Каждой моде нормальных колебаний соответствует определенная частота ω_q . Наиболее высокой частотой обладает нормальное колебание с минимальной длиной волны $\lambda_{\min} = 2a$, при котором соседние атомы колеблются в противофазе.

Каждое нормальное колебание характеризуется волновым числом $k_q = 2\pi/\lambda_q$. Набору длин волн нормальных колебаний соответствует набор волновых чисел

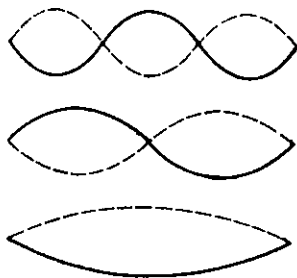


Рис. 7

$$k_q = \frac{\pi}{L} q, \quad q = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.10)$$

в котором минимальное и максимальное значения k_q равны

$$k_{\min} = \frac{2\pi}{2L} = \frac{\pi}{L}, \quad k_{\max} = \frac{\pi}{a}.$$

Общее число нормальных колебаний, которые могут существовать в цепочке из N атомов длиной $L = Na$, равно отношению $k_{\max}/k_{\min} = N$, т. е. числу атомов в цепочке.

Выше говорилось о том, что число квантов $\hbar\omega_q$, которое соответствует данному нормальному колебанию, определяется температурой тела. При этом энергия тепловых колебаний решетки может быть вычислена как сумма энергий всех возможных нормальных колебаний, которые возбуждены в решетке при температуре T . Каждый квант энергии $\hbar\omega_q$ условно можно рассматривать как энергию элементарного теплового возбуждения. При этом, однако, не следует забывать, что нормальное колебание представляет собой стоячую волну в твердом теле. Это обстоятельство не позволяет сопоставить элементарному тепловому возбуждению некоторую квазичастицу с энергией $\hbar\omega_q$, имеющую определенный импульс и способную перемещаться в кристаллической решетке.

Таким образом, введение нормальных колебаний позволяет описать тепловые колебания решетки при равновесии, но сталкивается с трудностью при описании процесса распространения тепла в твердом теле.

тепловые возбуждения в твердом теле, и приписать каждой такой квазичастице определенную энергию и импульс. Длинноволновые колебания ($\lambda \gg a$) распространяются в кристалле, как в непрерывной упругой среде, со скоростью звука v_{zv} . При условии $\lambda \gg a$ дискретность структуры кристалла никак не проявляется и скорость звука практически не зависит от длины волны (от волнового вектора k). Поэтому частота ω_q связана с длиной волны λ_q соотношением

$$\lambda_q = v_{zv}/v_q \quad (v_q = \omega_q/2\pi) \text{ или}$$

$$\omega_q = v_{zv} \frac{2\pi}{\lambda_q} = v_{zv} \cdot k_q.$$

Энергия упругой волны может принимать лишь дискретные значения $\hbar\omega_q(n+1/2)$, как и энергия квантового осциллятора. Каждому отдельному кванту энергии волны удобно поставить в соответствие квазичастицу с энергией $\epsilon_q = \hbar\omega_q$ и импульсом $p_q = \hbar k_q$ (скорость квазичастицы в общем случае определяется групповой скоростью распространения колебания $v_g = \frac{\partial \omega_q}{\partial k_q} = \frac{\partial \epsilon_q}{\partial p_q}$).

Введенный таким образом квант энергии, переносимой звуковой волной, получил название фонон. Название фонон было предложено впервые Я. Б. Френкелем по аналогии с названием кванта электромагнитной волны — фотона.

Наряду с акустическими волнами (рис. 8, а*) (и соответствующими им акустическими фононами) в кристаллах, состоящих из атомов различного сорта (например, из атомов различной массы), а также в кристаллах, состоящих из атомов одного сорта, но имеющих несколько атомов в элементарной ячейке, существует еще один тип коллективных возбуждений, при котором соседние атомы независимо от длины волны колеблются в противофазе. Три моды таких колебаний для цепочки, состоящей из атомов двух сортов, показаны на рис. 8, б, г. Вертикальные пунктирные линии обозначают границы элементарных ячеек. Впервые такой тип колебаний был обнаружен в ионных кристаллах (NaCl, KBr) при возбуждении их световой волной, вследствие чего он получил название оптических колебаний.

Таким образом, в кристаллах, где возможны оптические колебания, одному и тому же значению волнового числа $k_q = 2\pi/\lambda_q$ соответствуют две волны: акустическая и оптическая.

Оптические колебания, как и акустические, квантуются, и кванты энергии оптических колебаний принято называть оптиче-

*) Здесь и далее для наглядности колебания атомов в одномерных цепочках будут иллюстрироваться поперечными колебаниями вертикальной поляризации.

скими фононами. Частоты оптических колебаний слабо зависят от величины волнового числа (от длины волны) и по порядку величины совпадают с максимальной частотой $\omega_{\max}$ в спектре колебаний атомов.

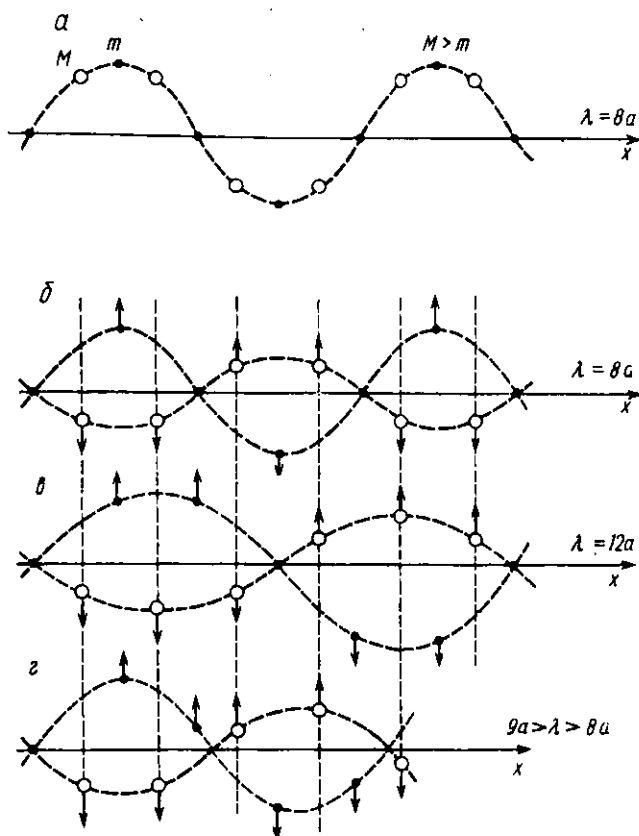


Рис. 8

§ 3. КОЛЕБАНИЯ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ

Основные качественные особенности колебаний решетки можно выяснить, рассматривая две простейшие одномерные модели.

Первая модель представляет собой одномерную цепочку, состоящую из N атомов одного сорта. В положении равновесия все атомы такой цепочки расположены на одинаковых расстояниях друг от друга (рис. 9). Элементарная ячейка в цепочке содержит один атом и является отрезком длины a , выбранным на оси x произвольным образом.

Вторая модель представляет собой одномерную цепочку, состоящую из атомов двух сортов (например, отличающихся своими массами m и M , $m < M$). Равновесное расположение атомов в такой цепочке показано на рис. 10. В этом случае элементарная ячейка содержит два атома разных сортов и является отрезком длиной $2a$, выбранным по оси x также произвольным образом.

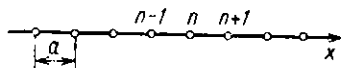


Рис. 9

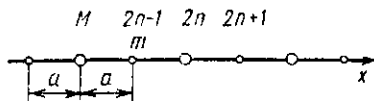


Рис. 10

Одномерность моделей означает, что каждый атом может смещаться только вдоль направления цепочки. Будем считать, что атомы в цепочках связаны между собой квазипружинами с коэффициентом β . Для простоты рассмотрим взаимодействие каждого атома только с двумя ближайшими соседями. Циклические граничные условия для одномерной цепочки атомов могут быть введены следующим образом: неэквивалентность положения атома внутри цепочки и на ее границах исчезает, если соединить противоположные концы цепочки, свернув ее в кольцо (рис. 11). В таком кольце смещение атома с номером n из положения равновесия должно тождественно совпадать со смещением атома с номером $n+N$, поскольку при полном обходе кольца мы вновь приходим к тому же самому атому. Рассмотренный прием эквивалентен продолжению цепочки с периодом L , равным Na , в обе стороны.

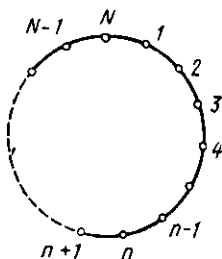


Рис. 11

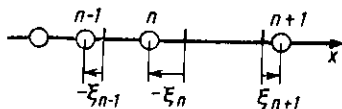


Рис. 12

1. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов одного сорта. Рассмотрим атом с произвольным номером n в цепочке, изображенной на рис. 9. Обозначим через ξ смещение атомов из положения равновесия (рис. 12). Смещения вправо для определенности будем считать положительными.

В положении равновесия сила f , действующая на каждый атом со стороны его соседей, равна нулю. При произвольных смещениях сила f_n , действующая на атом с номером n , пропорциональна изменению равновесных расстояний между атомами:

$$f_n = \beta(\xi_{n+1} - \xi_n) - \beta(\xi_n - \xi_{n-1}). \quad (2.13)$$

Уравнение движения n -го атома имеет вид

$$m\ddot{\xi}_n = \beta (\xi_{n+1} + \xi_{n-1} - 2\xi_n), \quad (2.14)$$

где m — масса атома.

Решение уравнения (2.14) будем искать в виде

$$\xi_n = \xi e^{i(\omega t + nka)}, \quad (2.15)$$

где ω — циклическая частота, ξ — амплитуда колебания, а k — постоянная величина. Подставляя (2.15) в (2.14), получаем

$$-m\omega^2 = \beta (e^{ika} + e^{-ika} - 2), \quad (2.16)$$

откуда *)

$$\omega = \pm 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \sin \frac{ka}{2}. \quad (2.17)$$

Зависимость ω от k изображена на рис. 13. Заметим, что полученное выражение (2.17) для частоты колебания n -го атома не зависит от номера n . Это означает, что все атомы в цепочке колеблются с одними и теми же частотами.

Частота колебаний атомов в одномерной цепочке ограничена сверху значением

$$\omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}}, \quad (2.18)$$

которое определяет собственную частоту колебаний атомов под действием квазиупругой силы

$$f = -4\beta\xi.$$

Физический смысл постоянной k можно выяснить при рассмотрении низкочастотных колебаний $\omega \ll \omega_{\max}$. При этом, очевидно, $\sin \frac{ka}{2} \ll 1$ и выражение для ω принимает вид

$$\omega \simeq \left(a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \right) k. \quad (2.19)$$

Линейная зависимость между ω и k для колебаний цепочки атомов в пределе низких частот аналогична зависимости частоты звуковых волн в непрерывной упругой струне от волнового числа $k = 2\pi/\lambda$:

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi \frac{v_{\text{зв}}^0}{\lambda} = v_{\text{зв}}^0 k, \quad (2.20)$$

где λ — длина волны, а $v_{\text{зв}}^0$ — скорость распространения звука в струне.

*) Поскольку частота ω не может иметь отрицательного значения, минус в формуле (2.17) соответствует области отрицательных значений k .

Действительно, для длинноволновых колебаний дискретность структуры цепочки, состоящей из отдельных атомов, не проявляется. В приближении $\lambda \gg a$ цепочку атомов можно рассматривать так же, как упругую однородную нить. Сопоставление выражений (2.19) и (2.20) показывает, что величина $a \sqrt{\frac{\beta}{m}}$ определяет скорость распространения упругих (звуковых) волн в цепочке при $\omega \rightarrow 0$, а величина $k = 2\pi/\lambda$ — модуль волнового вектора.

Низкочастотные колебания в линейной цепочке можно представить в виде бегущей звуковой волны $\sim e^{i(\omega t + kx)}$, где дискретная координата na вдоль цепочки, соответствующая положению равновесия атома с номером n , при $\lambda \gg a$ заменяется непрерывной координатой x . Соседние атомы при этом колеблются с практически одинаковой амплитудой и пренебрежимо малым сдвигом фазы $\Delta\phi = 2\pi a/\lambda \ll 1$ относительно друг друга.

Для наглядности такую бегущую по цепочке атомов волну можно изобразить в виде поперечных колебаний атомов. На рис. 14 показаны положения атомов цепочки для двух фиксированных моментов времени. Соотношение между ω и k (2.17) носит название дисперсионного уравнения. В области высоких ча-



Рис. 14

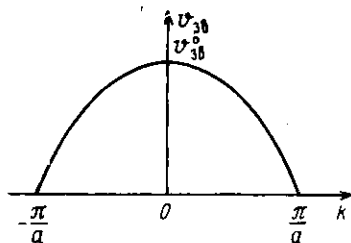


Рис. 15

стот $\omega \sim \omega_{\max}$ оно существенно отличается от выражения (2.19), справедливого для звуковых волн в цепочке (см. рис. 13). Отклонение зависимости ω от k от линейной при возрастании волнового вектора означает, что групповая скорость $v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k}$ распространения упругих возбуждений в цепочке атомов, которая является скоростью переноса колебательной энергии, уменьшается и обращается в нуль при $|k| = \pi/a$. Из (2.17) следует, что

$$v_g = \pm a \sqrt{\frac{\beta}{m}} \cos \frac{ka}{2} = v_{зв}^0 \cos \frac{ka}{2},$$

где $v_{зв}^0 = a \sqrt{\frac{\beta}{m}}$ — скорость звуковых волн в цепочке атомов с периодом a при $\omega \rightarrow 0$ (рис. 15). Знак минус в выражении для

групповой скорости относится к волнам, бегущим в обратном направлении.

Бегущая в цепочке волна при $|k|=\pi/a$ превращается в стоячую, которой соответствует колебание соседних атомов в противофазе (рис. 16). При $|k|=\pi/a$ частота колебаний достигает своего предельного значения $\omega=\omega_{\max}$ (см. (2.18)). В цепочке атомов одного сорта не могут существовать колебания с более высокими частотами. Условие $|k|=\pi/a$ и $\lambda=2a$ эквивалентно условию Вульфа—Брэггов для отражения рентгеновских волн кристаллической решеткой.

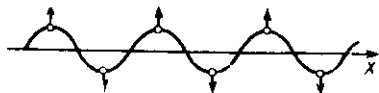


Рис. 16

Зависимость скорости звука от длины волны (или частоты) носит название дисперсии. Мерой дисперсии может служить величина отклонения скорости $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$ от ее значения v_g^0 при $k=0$. В одномерной цепочке атомов это отклонение достигает максимального значения при $|k|=\pi/a$, при котором $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$ обращается в нуль.

Таким образом, спектр частот собственных колебаний одномерной цепочки атомов одного сорта ограничен сверху частотой $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ и состоит из одной ветви продольных акустических колебаний.

В цепочке ограниченных размеров волновое число k в уравнении (2.17) не может принимать непрерывный ряд значений от 0 до π/a . Набор волновых чисел k должен удовлетворять условию цикличности $\xi_n = \xi_{n+N}$, из которого следует (см. (2.15)), что $e^{inka} = e^{i(n+N)ka}$ или $e^{iNka} = 1$. Последнее равенство определяет дискретный набор волновых чисел, подобный (2.12):

$$k_q = \frac{2\pi}{Na} q = \frac{2\pi}{L} q, \text{ где } q = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}. \quad (2.21)$$

Набор волновых чисел (2.21) определяет полный набор мод нормальных колебаний, которые могут существовать в цепочке длины L .

Каждому значению k_q из набора (2.21) соответствует определенная частота ω_q . Значения частоты ω_q расположены в интервале $0 \div \omega_{\max}$ и образуют квазинепрерывный частотный спектр колебаний цепочки атомов, который по своему характеру качественно согласуется с полученным из общих соображений спектром в § 3 (см. рис. 6). Спектр частот является эквидистантным в области длинноволновых колебаний. При переходе в коротковолновую область спектра расстояния между соседними разрешенными значениями частот уменьшаются и стремятся к нулю при $\omega \rightarrow \omega_{\max}$. Для цепочки можно ввести частоту ω_0 (см. § 3 гл. 1),

рассматривая колебания одного атома в цепочке при закрепленных остальных. С этой целью положим в формуле (1.16) $\xi_{n+1} = \xi_{n-1} = 0$. Тогда $m\ddot{\xi}_n = -2\beta\xi_n$ и, следовательно, $\omega_0 = \sqrt{2\beta/m} = \frac{\omega_{\max}}{\sqrt{2}}$.

Как и следовало ожидать, ω_0 расположена внутри спектра частот, ближе к $\omega_{\max}$.

Если к любому значению k_q из интервала $|k_q| \leq \pi/a$ прибавить $2\pi/a, 4\pi/a, 6\pi/a$ и т. д., то, очевидно, волновые числа $|k_q| + 2\pi/a, |k_q| + 4\pi/a, \dots$ дадут то же самое значение ω_q , что и число k_q . Поэтому закон дисперсии $\omega(k)$ полностью определяется значениями k_q , расположенными в интервале $-\pi/a \leq k_q \leq +\pi/a$. Этот интервал значений k_q принято называть зоной Бриллюэна.

Отметим, что, поскольку q должно быть целым числом, колебания, соответствующие $k = \pm\pi/a$ ($q = \pm N/2$), возможны только в цепочке, состоящей из четного числа атомов $N = 2N'$, где N' — целое число. Это условие, однако, при достаточно большом $N \gg 1$ не накладывает никаких принципиальных ограничений на модель решетки.

2. Колебания одномерной цепочки, состоящей из атомов двух сортов. Будем считать, как это показано на рис. 10, что атомы с массами M и m ($M > m$, например) расположены соответственно в четных и нечетных узлах цепочки. Уравнения движения двух соседних атомов с номерами $2n$ и $2n+1$ по аналогии с (2.14) можно записать следующим образом:

$$M\ddot{\xi}_{2n} = \beta(\xi_{2n+1} + \xi_{2n-1} - 2\xi_{2n}), \quad (2.22)$$

$$m\ddot{\xi}_{2n+1} = \beta(\xi_{2n+2} + \xi_{2n} - 2\xi_{2n+1}),$$

где ξ_{2n} и ξ_{2n+1} — соответствующие смещения $2n$ -го и $(2n+1)$ -го атомов из положения равновесия, а β имеет тот же смысл, что и ранее. Решение уравнений (2.22) будем искать в виде, аналогичном (2.15), принимая во внимание, однако, что теперь колебания атомов разных масс могут происходить с различными амплитудами ξ и η :

$$\xi_{2n} = \xi e^{i(\omega t + 2nka)}, \quad (2.23)$$

$$\xi_{2n+1} = \eta e^{i[\omega t + (2n+1)ka]}.$$

Подстановка решений (2.23) в уравнение (2.22) приводит к системе, линейной относительно ξ и η однородных уравнений:

$$\begin{aligned} -\omega^2 M \xi &= \beta \eta (e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta \xi, \\ -\omega^2 m \eta &= \beta \xi (e^{ika} + e^{-ika}) - 2\beta \eta. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Система уравнений (2.24) имеет нетривиальное решение только тогда, когда детерминант из ее коэффициентов равен нулю:

$$\begin{vmatrix} 2\beta - \omega^2 M & -2\beta \cos ka \\ -2\beta \cos ka & 2\beta - \omega^2 m \end{vmatrix} = 0. \quad (2.25)$$

Раскрывая (2.25), получим биквадратное уравнение для частоты колебаний ω , решение которого дает две различные ветви спектра собственных частот ω_+ и ω_- :

$$\omega_{\pm}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{Mm}} \quad (2.26)$$

(обратим внимание на то, что ω_+ и ω_- также не зависят от номера n и являются собственными частотами колебаний любого из атомов цепочки).

Рассмотрим поведение ω_+ и ω_- при малых значениях аргумента $ka \ll 1$. В этом приближении

$$\begin{aligned} \omega_+ &\simeq \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}, \\ \omega_- &\simeq \left(a \sqrt{\frac{2\beta}{M+m}} \right) k. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Сопоставляя (2.27) и (2.19), можно заключить, что зависимость ω_- от k описывает ветвь продольных акустических колебаний. Значение скорости звука для этой ветви в пределе длинных волн дается выражением

$$v_{зв}^0 = a \sqrt{\frac{2\beta}{M+m}}, \quad (2.28)$$

которое при $m=M$ переходит в выражение для скорости звука $v_{зв}^0 = a \sqrt{\beta/m}$ в монокристаллической цепочке.

Кроме акустической ветви $\omega_-(k)$ в спектре колебаний появилась дополнительная ветвь $\omega_+(k)$. Для того чтобы выяснить ее физический смысл, сопоставим между собой отношения ξ/η амплитуд колебаний в одной и другой ветвях при малых значениях k ($ka \ll 1$). Отношение ξ/η может быть найдено при подстановке в любое из уравнений (2.24) соответствующего значения частоты ω_+ или ω_- . Подставляя значение ω_- , находим $(\xi/\eta)_- = +1$. Полученное выражение означает, что колебания соседних атомов цепочки происходят в фазе и имеют одинаковые амплитуды. Такой тип колебаний характерен для акустической волны. При подстановке выражения для ω_+ из (2.27) в (2.24) получаем, что

$$(\eta/\xi)_+ = -M/m. \quad (2.29)$$

Отсюда следует, что амплитуда $\frac{M\xi + m\eta}{M+m}$ смещения центра масс атомов в элементарной ячейке равна нулю. Это означает, что ветвь $\omega_+(k)$ соответствует при $ka \ll 1$ таким колебаниям атомов цепочки, при которых центр масс каждой элементарной ячейки остается неподвижным, т. е. соседние атомы колеблются в противофазе (оптические колебания).

Построим теперь дисперсионные кривые $\omega_-(k)$ и $\omega_+(k)$ для акустической и оптической ветвей спектра.

При малых положительных и отрицательных значениях волнового вектора ω_- возрастает пропорционально $|k|$ (см. (2.27)). При дальнейшем увеличении $|k|$ величина $\sin ka$ в формуле (2.26) растет, проходит через максимум при $k = \pm \pi/2a$ и затем вновь уменьшается, обращаясь в нуль при $k = \pm \pi/a$. Соответственно частота ω_- возрастает, достигает максимального значения $\omega_{-max} = \sqrt{2\beta/M}$ при $k = \pm \pi/2a$ и обращается в нуль при $k = \pm \pi/a$ (рис. 17, нижняя кривая).

Частота оптических колебаний ω_+ при $k=0$ (см. (2.21) — (2.22)) имеет максимальное значение, равное

$$\sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}.$$

Нетрудно показать, что $\frac{\partial \omega_-}{\partial k} = 0$ при $k=0$. При увеличении k ω_- уменьшается, проходит при $k = \pm \pi/2a$ через минимум $\omega_{-min} = \sqrt{\frac{2\beta}{m}}$ и затем воз-

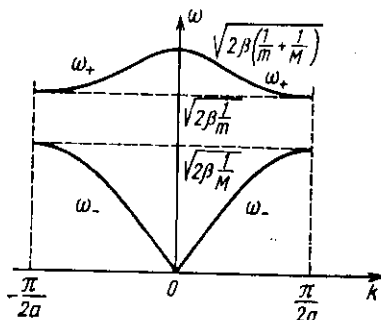


Рис. 17

растает до своего первоначального (при $k=0$) значения при $k \rightarrow \pm \frac{\pi}{a}$ (рис. 17, верхняя кривая). При $k = \pi/2a$ величина $\frac{\partial \omega_+}{\partial k}$ также равна нулю.

Как видно из рис. 17, весь спектр разрешенных частот колебаний цепочки заключен в интервале от 0 до $\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$ для акустической ветви и в интервале от $\sqrt{\frac{2\beta}{m}}$ до $\sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)}$ для оптической ветви. Между этими интервалами в пределах от $\sqrt{\frac{2\beta}{m}}$ до $\sqrt{\frac{2\beta}{M}}$ расположена полоса запрещенных частот. Интервал частот оптических колебаний одномерной цепочки расположен выше частотного интервала акустических колебаний и становится очень узким при $M \gg m$. Все частоты оптических колебаний в этом случае близки к предельному значению частоты

$$\omega_{max} = \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)} \simeq \sqrt{2\beta \frac{1}{m} \left(1 + \frac{m}{2M} \right)}.$$

Различные значения частот в каждой ветви спектра колебаний цепочки, состоящей из атомов двух сортов, соответствуют изменению модуля волнового числа от 0 до $\frac{\pi}{2a}$, а не до $\frac{\pi}{a}$, как это было в случае монокристаллической цепочки.

Дискретный набор волновых чисел может быть найден из условий цикличности $\xi_{2n} = \xi_{2n+N}$ или $\xi_{2n+1} = \xi_{2n+1+N}$, которые приводят к аналогичному (2.21) соотношению

$$k_q = \frac{2\pi}{Na} q = \frac{2\pi}{L} q; \quad q = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{4}. \quad (2.30)$$

Каждому значению модуля k_q из (2.30) соответствует определенное значение длины волны $\lambda_q = \frac{2\pi}{k_q}$, заключенное в интервале от $4a$ до L .

Число различных колебаний (вслн) в каждой ветви спектра определяется числом дискретных значений волновых чисел k_q , расположенных в интервале от $-\frac{\pi}{2a}$ до $+\frac{\pi}{2a}$, и равно $\frac{\pi}{a} / \frac{2\pi}{L} = \frac{L}{2a} = \frac{N}{2}$. Полное число различных состояний, соответствующих акустической и оптической ветвям спектра, как и в случае монокристаллической цепочки, равно полному числу N атомов. Обратим внимание на то, что условие $\frac{M \pm m\eta}{M + m}$, означающее, что центр масс каждой элементарной ячейки остается неподвижным при оптических колебаниях, эквивалентно условию $\frac{\partial \omega_+}{\partial k} = 0$. Поэтому при оптических колебаниях, когда соседние атомы колеблются в противофазе, амплитуда колебаний центра масс элементарной ячейки равна нулю только при значениях $k=0$ и $k=\pi/a$ и близка к нулю в окрестности этих значений волнового вектора. Для промежуточных значений волнового вектора групповая скорость $\frac{\partial \omega_+}{\partial k} \neq 0$, так что оптическим колебаниям в этой области соответствуют бегущие оптические волны, которые могут переносить энергию.

Дискретный (или, точнее, квазидискретный, поскольку расстояния между соседними значениями очень малы) спектр частот ω_q определяется набором абсолютных значений (модулей) волновых чисел из интервала $-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$, являющегося зоной Бриллюэна для двухатомной цепочки. В акустической и оптической ветвях колебаний каждому такому значению ω_q соответствуют две бегущие волны с волновыми числами $+k_q$ и $-k_q$. Поэтому зависимость $\omega(k)$ обычно представляется кривой, расположенной симметрично относительно начала координат ($k=0$) в зоне Бриллюэна.

Вместе с тем необходимо учитывать, что период решетки (в данном случае равный $2a$) определяет период функции $\omega(k)$, равный размерам зоны Бриллюэна: $2\pi/2a = \pi/a$. Это позволяет транслировать кривую $\omega(k)$ по оси k на произвольное число периодов $\frac{\pi}{a}$.

Рассмотрим теперь, как меняется характер акустических (ω_-) и оптических (ω_+) колебаний при $k \rightarrow \pi/2a$. Вблизи этого значения (т. е. при $ka = \pi/2 - \delta$, где $\delta \ll 1$) отношения амплитуд ξ/η колебаний тяжелых и легких атомов имеют вид:

для акустической ветви

$$(\eta/\xi)_- \simeq \frac{\delta}{1 - \frac{m}{M}} > 0;$$

для оптической ветви

$$(\xi/\eta)_+ \simeq \frac{\delta}{\frac{M}{m} - 1} < 0. \quad (2.31)$$

Эти выражения показывают, что по мере приближения к граничному значению $k = \pi/2a$ (т. е. при $\delta \rightarrow 0$) происходит уменьшение амплитуды η колебаний легких атомов в акустической ветви и амплитуды ξ колебаний тяжелых атомов — в оптической. При этом, как и при малых значениях k , в акустической ветви соседние атомы колеблются в фазе, а в оптической — в противофазе.

При предельном переходе от цепочки, состоящей из атомов двух сортов ($m \neq M$), к моноатомной цепочке ($m \rightarrow M$) энергетическая щель между ветвями ω_+ и ω_- обращается в нуль, и оптические ветви в интервалах $\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$ и $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq -\frac{\pi}{2a}$ становятся продолжением акустических ветвей в интервалах $0 \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$ и $-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq 0$ соответственно. Так как при этом меняется период трансляции, исчезают оптические ветви в интервале $-\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{2a}$ и акустические ветви в интервалах $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq -\frac{\pi}{2a}$ и $\frac{\pi}{2a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$.

Таким образом, при переходе к пределу $m \rightarrow M$ спектр акустических и оптических колебаний вырождается в две акустические ветви, изображенные на рис. 13.

Возникновение ветви оптических колебаний в цепочке, состоящей из атомов двух сортов, можно пояснить следующим образом. При $m = M$ волны испытывают брэгговские отражения, когда k достигает значений $\pm \frac{\pi}{a}$ (при $k = \pm \frac{\pi}{a}$ групповая скорость акустического возбуждения $\frac{\partial \omega}{\partial k}$ обращается в нуль (рис. 15)).

Предположим теперь, что масса четного атома постепенно увеличивается. Как только массы четных и нечетных атомов стали различаться в цепочке, появляется новый период, равный $2a$. Усло-

вие отражения Вульфа—Брэггов для этого нового периода выполняется при значении $k = \pm \frac{\pi}{2a}$. Если массы атомов различаются незначительно, то при k , отличных от значения $\pm \frac{\pi}{2a}$, зависимость ω от k практически не меняется. Групповая скорость возбуждений уменьшается только при $|k| \rightarrow \frac{\pi}{2a}$ и обращается в нуль при равенстве $|k| = \frac{\pi}{2a}$. В результате кривая $\omega(k)$ разрывается при $k = \pm \frac{\pi}{2a}$ таким образом, чтобы пересечь вертикальную линию $k = \pm \frac{\pi}{2a}$ под прямым углом (см. рис. 13). Кривая $\omega(k)$ распадается на две ветви, разделенные областью запрещенных частот ω (нижняя ветвь соответствует акустическим, верхняя — оптическим колебаниям). Ширина этой области (щели) увеличивается при увеличении разницы между m и M . Одновременно с удвоением периода цепочки уменьшается вдвое период функции $\omega(k)$ и становится равным $\frac{\pi}{a}$ (вместо $\frac{2\pi}{a}$ для монокристаллической цепочки). Полученные куски кривой $\omega(k)$ можно транслировать по оси k на этот период, приходя к картине, изображенной на рис. 17.

Обратим внимание, что при удвоении периода точки $k=0$ и $k=\pi/a$ становятся эквивалентными (см. рис. 17). Однако до этой операции значение $k=\pi/a$ соответствовало предельно короткой длине волны ($\lambda=2a$) для акустических колебаний одноатомной цепочки (см. рис. 16), а значение $k=0$ — длине волны $\lambda=\infty$. Вместе с тем при малом изменении массы четных атомов характер колебаний не может существенно измениться.

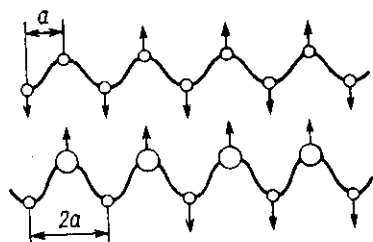


Рис. 18

В связи с этим может возникнуть вопрос, каким образом коротковолновые акустические колебания при $k=\pi/a$ (см. рис. 13) трансформируются в оптические с $\lambda=\infty$ (см. рис. 17). Ответ на этот вопрос заключается в том, что при изменении массы четных атомов (кроме удвоения периода) возникают две подрешетки, состоящие из легких и тяжелых атомов. В результате противофазные колебания

соседних атомов, представляющие коротковолновые ($\lambda=2a$) акустические колебания, становятся эквивалентными колебанию двух подрешеток (друг относительно друга в противофазе, что соответствует $\lambda=\infty$ в оптической ветви (рис. 18)).

§ 4. КОЛЕБАНИЯ ЦЕПОЧКИ АТОМОВ С ДВУМЯ И ТРЕМЯ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ

Под цепочкой с двумя и тремя степенями свободы подразумеваются цепочки, в которых возможно движение атомов в плоскости, содержащей цепочку (две степени свободы), и в любом направлении в пространстве (три степени свободы).

Движение атомов в цепочке с двумя степенями свободы можно разложить на две взаимно перпендикулярные составляющие, направленные вдоль и перпендикулярно оси цепочки. У цепочки с тремя степенями свободы удобно рассматривать три составляющие колебаний: вдоль направления цепочки и в двух взаимно перпендикулярных направлениях в плоскости, перпендикулярной оси цепочки.

Таким образом, наличие у цепочек нескольких степеней свободы приводит к новому качеству — возможности распространения в них волн двух типов: продольных и поперечных. В продольных волнах вектор смещения атомов (вектор поляризации колебаний) направлен вдоль цепочки и совпадает с направлением распространения волны (с волновым вектором k). В поперечных волнах вектор смещения направлен перпендикулярно оси цепочки и перпендикулярен вектору k . Спектр колебаний таких цепочек нетрудно построить, используя результаты, полученные при рассмотрении колебаний цепочки с одной степенью свободы (п. 2 § 3).

Закон дисперсии для продольных колебаний двух- и трехмерных цепочек совпадает с полученным выше (2.17). Закон дисперсии для поперечных колебаний отличается только величиной коэффициента перед $\sin \frac{ka}{2}$, определяющего скорость распространения волны.

Скорость звука $v_{зв\parallel}$ продольно поляризованной волны обычно превышает скорость звука $v_{зв\perp}$ волны с поперечной поляризацией. Это связано с тем, что продольные колебания представляют собой волны сжатия, для которых упругие силы больше, чем для поперечных волн сдвига.

Для малых k законы дисперсии продольных и поперечных волн имеют вид

$$\omega_{\parallel} = v_{зв\parallel} \cdot k, \quad \omega_{\perp} = v_{зв\perp} \cdot k. \quad (2.32)$$

Так как $v_{зв\parallel} > v_{зв\perp}$, то продольным волнам соответствует большее предельное значение частоты на границах зоны (при $k = \pm \frac{\pi}{a}$). Кривые $\omega_{\parallel}(k)$ и $\omega_{\perp}(k)$ изображены на рис. 19, а.

В связи с тем, что колебания цепочки в плоскости, перпендикулярной ее оси, изотропны, $v_{зв\perp}$ не зависит от направления вектора поляризации в поперечной волне. Поэтому закон дисперсии у трехмерной цепочки совпадает с законом дисперсии двухмер-

ной, если считать, что для трехмерной цепочки ветвь $\omega_{\perp}(k)$ двукратно вырождена.

Рассмотрим теперь, как изменится закон дисперсии, изображенный на рис. 19, а, при переходе к цепочке с двумя атомами в элементарной ячейке. Для этого предположим, что каждый четный атом цепочки постепенно утяжеляется. Любое, даже незначительное, утяжеление четных атомов приводит сразу же к тому, что период удваивается, в результате чего изменяется условие Вульфа—Брэггов для упругих волн (при учете взаимодействия атомов только с ближайшими соседями*), которое приобретает вид: $\lambda=4a$. Это изменение эквивалентно появлению новых границ зоны Бриллюэна, вблизи которых зависимость частоты от импульса изменяется таким образом, чтобы производная $\frac{\partial\omega}{\partial k}$ обратилась в нуль при $k=\pm \frac{\pi}{2a}$ (рис. 19, б).

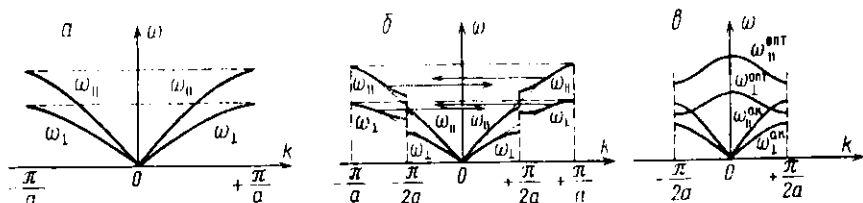


Рис. 19

Учтем теперь, что в результате уменьшения размеров зоны Бриллюэна вдвое период трансляций (периодичность зависимости ω от k) уменьшился в два раза и стал равным π/a . Картина, изображенная на рис. 19, б, не удовлетворяет новой периодичности $\omega(k)$, так как при ее построении было учтено только влияние новых границ зоны. Чтобы привести ее в соответствие с новой периодичностью зависимости $\omega(k)$, нужно протранслировать полученные куски кривых на расстояние π/a по оси k . Направление и величина трансляций показаны стрелками на рис. 19, б. После трансляций возникает спектр, представленный на рис. 19, в. Построенный спектр состоит из двух ветвей продольных ($\omega_{\parallel}^{\text{ак}}(k)$) и поперечных ($\omega_{\perp}^{\text{ак}}(k)$) акустических фононов и двух ветвей продольных ($\omega_{\parallel}^{\text{опт}}(k)$) и поперечных ($\omega_{\perp}^{\text{опт}}(k)$) оптических фононов. У цепочки с тремя степенями свободы ветви спектра $\omega_{\perp}^{\text{ак}}$ и $\omega_{\perp}^{\text{опт}}$ двукратно вырождены.

Обратим внимание, что величина разрыва частоты в продольных и поперечных ветвях спектра при $\pm \frac{\pi}{2a}$ определяется раз-

*) Физический смысл этого значения будет разъяснен далее.

личием масс легких и тяжелых атомов (см. рис. 17). Если различие масс невелико, величина разрывов мала и ветви $\omega_{\parallel}^{\text{ак}}$ и $\omega_{\perp}^{\text{опт}}$ могут перекрываться (рис. 19, в). При увеличении разницы масс атомов величина разрыва растет. Верхняя граница спектра акустических фононов (предельная частота $\omega_{\parallel \text{max}}^{\text{ак}}$) понижается при увеличении M , а нижняя граница спектра оптических фононов (минимальная частота $\omega_{\perp \text{min}}^{\text{опт}}$) увеличивается, если уменьшается m . Это может привести к тому, что в спектре фононов появится интервал запрещенных частот, разделяющий оптические и акустические колебания.

В заключение заметим, что рассмотренные цепочки атомов являются единственными системами, у которых спектр колебаний однозначно описывается двумя или четырьмя ветвями функции $\omega(k)$.

§ 5. ИЗМЕНЕНИЕ ЗАКОНА ДИСПЕРСИИ КОЛЕБАНИЙ ЦЕПОЧКИ АТОМОВ ПРИ УЧЕТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ЧЕТЫРЬМЯ БЛИЖАЙШИМИ СОСЕДАМИ

Возникновение дисперсии звуковых волн в одноатомной цепочке объяснялось выше эффектом образования стоячей волны при условии $\lambda=2a$, $k=\pm\pi/a$, совпадающем при $n=1$ с условием $n\lambda=2a$ Вульфа—Брэггов для рассеяния рентгеновских волн кристаллической решеткой. Следует, однако, иметь в виду, что это совпадение чисто формальное. Звуковые волны являются результатом колебания самих атомов решетки, и поэтому говорить о рассеянии этих волн на атомах решетки бессмысленно.

Поскольку условие Вульфа—Брэггов неприменимо к звуковым волнам в кристалле, необходимо выяснить, к чему приводит более полный учет сил взаимодействия между атомами. Учтем кроме взаимодействия между соседними атомами с силовой пос-

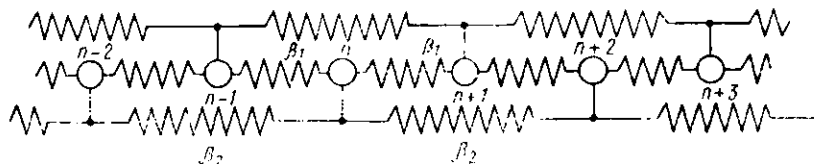


Рис. 20

тоянной β_1 также прямое взаимодействие атома с номером n с атомами с номерами $n-2$ и $n+2$. Схематически такое взаимодействие изображено на рис. 20.

Сила f_n , действующая на атом с номером n , определяется теперь суммарным взаимодействием атома n с атомами $n-2$, $n-1$, $n+1$, $n+2$ и может быть записана в виде

$$f_n = \sum_{i=\pm 1}^{\pm 2} \beta_i (\xi_{n-i} - \xi_n). \quad (2.33)$$

Ищем решение уравнения движения

$$m\ddot{\xi}_n = f_n \quad (2.34)$$

для n -го атома в виде

$$\xi_n = \xi e^{i(\omega t - kna)}. \quad (2.35)$$

Подставляя ξ_n в (2.34), находим

$$\omega^2 = \omega_1^2 + \omega_2^2 = \frac{4}{m} \left(\beta_1 \sin^2 \frac{ka}{2} + \beta_2 \sin^2 ka \right). \quad (2.36)$$

Полученное выражение для частоты отличается от (2.17) членом (коэффициентом β_2), который описывает вклад в колебания атомов взаимодействия с периодом $2a$.

Характерной особенностью выражения (2.36) является то, что $\frac{\partial (\omega)^2}{\partial k}$ равняется нулю при $k=0$ и $k=\pm \frac{\pi}{a}$. Построить зависимость ω^2 от k проще всего методом графического суммирования. На рис. 21,а изображены зависимости

$$\omega_1^2 = \frac{4}{m} \beta_1 \sin^2 \frac{ka}{2} \quad \text{и} \quad \omega_2^2 = \frac{4}{m} \beta_2 \sin^2 ka$$

от k и результирующая зависимость ω^2 от k .

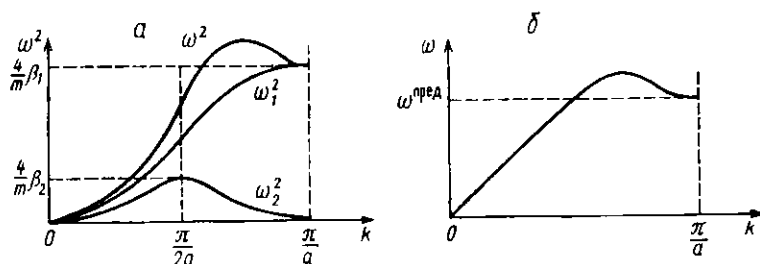


Рис. 21

Если $\beta_2 \ll \beta_1$, то учет взаимодействия с периодом $2a$ приводит лишь к слабому искажению закона дисперсии, полученного при учете взаимодействия только соседних атомов. Если же β_2 сравнимо по величине с β_1 , то на кривой $\omega^2(k)$ появляется максимум, расположенный внутри зоны Бриллюэна в интервале $\frac{\pi}{2a} < k < \frac{\pi}{a}$.

При суммировании кривых $\omega_1^2(k)$ и $\omega_2^2(k)$ максимум на кривой $\omega_2^2(k)$, расположенный при $k=\pi/2a$, смещается вправо в результате наклона кривой $\omega_1^2(k)$. Величина максимума на кривой $\omega^2(k)$ характеризует, таким образом, величину коэффициента β_2 ,

т. е. основную постоянную взаимодействия атомов, расположенных на расстоянии $2a$ друг от друга.

Роль коэффициента β_2 проявляется обычно наиболее сильно в волнах сжатия. Например, у свинца для продольной волны, распространяющейся в направлении $[100]$ $\beta_2 \approx \beta_1/3$, что приводит к появлению максимума на соответствующей кривой $\omega_1(k)$ в законе дисперсии.

Так как силы взаимодействия атомов быстро убывают с расстоянием, коэффициент β_3 , учитывающий взаимодействие атомов через три периода, у свинца уже достаточно мал ($\beta_3 \approx \beta_1/13$) и его роль сводится лишь к слабому искажению дисперсионной кривой. От зависимости ω^2 от k нетрудно перейти к зависимости ω от k .

При этом учтем, что при малых k ($ka \ll 1$)

$$\omega^2 \approx \frac{a^2}{m} (\beta_1 + 4\beta_2) k^2$$

и зависимость ω от k вблизи начала координат является линейной:

$$\omega \approx \left(a \sqrt{\frac{\beta_1 + 4\beta_2}{m}} \right) k.$$

При $\beta_2 = 0$ она, естественно, переходит в (2.19). При $|k| = \pi/a$, как уже отмечалось, $\frac{\partial \omega^2}{\partial k} = 2\omega \frac{\partial \omega}{\partial k} = 0$, и поэтому на границе зоны кривая $\omega(k)$ имеет горизонтальную касательную.

Характер закона дисперсии $\omega_{||}(k)$ при существенном вкладе более дальних взаимодействий между атомами изображен на рис. 21, б.

Появление максимума внутри зоны Бриллюэна, которое представляется парадоксальным с точки зрения условия Вульфа—Брэггов, является результатом особенностей колебаний атомов в решетке при наличии достаточно медленно изменяющихся с расстоянием сил взаимодействия, когда силы, действующие на атом, определяются не только ближайшими соседями, но и более удаленными атомами. Появление максимума внутри зоны означает, что при соответствующем значении k в кристалле возникает стоячая волна с длиной $2a < \lambda < 4a$ и групповая скорость обращается в нуль.

Причину появления максимума можно пояснить следующим образом. При $|k| = \pi/a$ атомы цепочки колеблются в противофазе. В поперечной волне колебание атома с номером n происходит под действием проекции $f_{1\perp}$ силы f_1 , действующей между соседними атомами, на направление смещения атома. Сила f_1 возникает в результате изменения равновесного расстояния a между соседними атомами. Сила f_2 , определяющаяся взаимодействием атомов с номерами n и $n \pm 2$, пропорциональна величине изменения равновесного расстояния между ними и отлична от нуля лишь в том случае, когда это расстояние не равно $2a$. Легко заметить,

что если соседние атомы колеблются в противофазе, силы f_1 и $f_{1\perp}$ отличны от нуля все время (за исключением частного случая, когда атомы с номерами n и $n \pm 1$ одновременно проходят через положения равновесия), а сила f_2 все время равна нулю, так как атомы с номерами n и $n \pm 2$ колеблются синфазно и расстояние между ними не изменяется. Поэтому учет взаимодействия атомов на расстояниях $2a$ не изменяет значения частоты $\omega_{\text{пред}}$ колебаний на границе зоны. При уменьшении k от значения π/a синфазность колебаний атомов с номерами n и $n \pm 2$ нарушается, что приводит к появлению дополнительной силы $f_{2\perp}$, действующей на атом с номером n .

Возникновение дополнительных сил взаимодействия эквивалентно увеличению «жесткости» цепочки и приводит к увеличению частоты колебаний. При дальнейшем уменьшении k преобладает обычный механизм уменьшения частоты при увеличении длины волны, в результате чего частота колебаний проходит через максимум.

§ 6. ОСОБЕННОСТИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗВУКОВЫХ ВОЛН В ТРЕХМЕРНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

Рассмотрим колебания анизотропной трехмерной решетки. Этот случай более сложен, поскольку атомы обычно колеблются не в соответствующих атомных плоскостях, а под некоторым углом к ним.

Любую кристаллическую решетку можно бесконечным числом способов разбить на семейства эквидистантных атомных плоскостей так, чтобы все атомы располагались только на этих плоскостях. Пример такого разбиения для простой кубической решетки показан на рис. 65, на котором изображены проекции нескольких семейств плоскостей, параллельных оси $[100]$, на плоскость, перпендикулярную $[100]$. Семейство 1 представляет собой совокупность плоскостей с периодом a ; семейство 2 — $a/\sqrt{2}$, семейство 3 — $a/\sqrt{5}$ и т. д.

Одновременно с уменьшением периода уменьшается плотность атомов, расположенных в каждой плоскости. Все плоскости повернуты относительно друг друга вокруг оси $[100]$ на некоторый угол $\Delta\varphi$. Угол между двумя соседними семействами плоскостей (минимальное значение угла $\Delta\varphi$) чрезвычайно мал: $\Delta\varphi_{\min} \simeq a/L$, где a — постоянная решетки, а L — размер кристалла. Поэтому практически каждому направлению в решетке можно найти семейство перпендикулярных ему эквидистантных плоскостей.

Звуковую волну в кристалле, распространяющуюся в направлении k , можно рассматривать как результат смещения атомных плоскостей в семействе, перпендикулярном k , друг относительно друга. Такие плоскости по определению являются плоскостями постоянной фазы, атомы в каждой из них движутся синфазно. Скорость волны определяется силами, возникающими при смеще-

нии плоскостей относительно друг друга, в соответствующем данному направлению k семействе. Эти силы для каждого семейства плоскостей зависят от анизотропии атомов в решетке. Вид потенциальной ямы формируется взаимодействием данного атома с окружающими его соседями в области, имеющей размеры нескольких межатомных расстояний, и, таким образом, зависит от расположения атомов в этой области. Потенциальные ямы всегда анизотропны, даже в простой кубической решетке.

При распространении волны атомы в n -й атомной плоскости движутся под действием силы со стороны атомов, расположенных в смещающихся соседних ($n \pm 1$, $n \pm 2$, $n \pm 3$, ...) плоскостях.

Анизотропия потенциальных ям приводит к тому, что атомы в каждой атомной плоскости семейства смещаются в общем случае под углом к вектору k . Колебания атомов в этом направлении являются линейно поляризованными.

Только при определенных направлениях волнового вектора относительно кристаллографических осей (например, $[100]$, $[110]$, $[111]$ для простой кубической решетки) направления смещения атомов параллельны или перпендикулярны k . Это означает, что при этих направлениях k в решетке могут распространяться строго продольно или поперечно поляризованные волны, которые можно возбуждать независимо друг от друга. При любых других направлениях вектора k в решетке этого сделать невозможно.

Для того чтобы определить, какой характер имеют колебания при произвольной ориентации вектора k в решетке, рассмотрим, что произойдет, если слегка изменить ориентацию волнового вектора относительно одного из рациональных направлений, при которых существуют волны строго продольной (L) или строго поперечной (T_1 , T_2) поляризации. Взаимное расположение вектора k и трех направлений поляризации продольных и поперечных волн в исходном состоянии изображено на рис. 22, a .

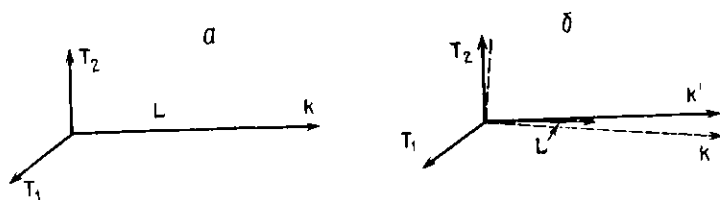


Рис. 22

Рассмотрим вначале продольную волну. Изменим направление распространения волны, т. е. отклоним немного вектор k от рационального направления. При этом в результате анизотропии потенциальных ям направление смещения атомов уже не будет совпадать с k , но в силу малости изменения ориентации отклонение вектора поляризации колебаний атомов от k будет также мало. Возникающую при этом волну принято называть квазипро-

дольной, так как она переходит в строго продольную при повороте вектора $\mathbf{k}$ в исходное положение.

Рассмотрим теперь поперечные волны. В начальном положении вектора $\mathbf{k}$ колебания атомов в поперечной волне имеют две взаимно перпендикулярные поляризации $\mathbf{T}_1$ и $\mathbf{T}_2$, направленные перпендикулярно $\mathbf{k}$. При отклонении $\mathbf{k}$ векторы $\mathbf{T}_1$ и $\mathbf{T}_2$ также отклонятся на небольшие углы от своего первоначального положения (см. рис. 22, б).

В соответствующих им волнах векторы поляризации колебаний уже не перпендикулярны $\mathbf{k}$. Такие волны принято называть квазипоперечными. Можно показать, что в общем случае каждому вектору $\mathbf{k}$ соответствуют только три направления поляризации колебания атомов $\mathbf{L}$, $\mathbf{T}_1$, $\mathbf{T}_2$, образующие ортогональную тройку векторов, повернутых на некоторый угол относительно вектора $\mathbf{k}$.

Таким образом, волну вдоль заданного направления $\mathbf{k}$ можно возбудить, вызывая колебания атомов только в трех строго определенных взаимно перпендикулярных направлениях в решетке. Колебания атомов с другой поляризацией генерируют волну, распространяющуюся в другом направлении.

Скорости распространения квазипродольных ($\mathbf{L}$) или квазипоперечных ($\mathbf{T}_1$, $\mathbf{T}_2$) волн в кристаллической решетке зависят от направления. Эта зависимость имеет место даже в простой кубической решетке. Скорость поперечных волн в общем случае зависит от направления поляризации, и только при ориентации $\mathbf{k}$ вдоль оси третьего или более высокого порядка эта зависимость пропадает.

Скорость квазипродольных волн всегда выше, чем скорость квазипоперечных волн, так как в квазипродольной волне преобладает деформация решетки типа сжатия, а в квазипоперечных — типа сдвига.

Другой особенностью распространения волн в кристаллической решетке является зависимость предельного значения волнового вектора $k_{\text{пред}}$, определяющего минимально возможную длину волны для данного направления $\mathbf{k}$, от направления в решетке.

Значения $|k_{\text{пред}}|$ определяют положение границ зоны Бриллюэна в пространстве волновых векторов (в $\mathbf{k}$ -пространстве).

Глава 3 ФОНОНЫ

§ 1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ

Как мы уже говорили, в кристалле могут распространяться только три волны, направление поляризации которых однозначно определяется $\mathbf{k}$. Каждой из этих волн соответствует одна ветвь зависимости ω от $\mathbf{k}$ в спектре колебаний. Поэтому спектр колебаний

решетки при каждом фиксированном направлении волнового вектора описывается тремя ветвями для акустических (в кристаллах с одним атомом в элементарной ячейке) и шестью ветвями для акустических и оптических фононов (в кристаллах с несколькими атомами в элементарной ячейке).

Характер спектра акустических фононов иллюстрирует рис. 23, на котором изображены дисперсионные кривые для алюминия при $k \parallel [110]$. Зависимости $\omega(k)$ определяют спектр лишь при фиксированных направлениях вектора k и не характеризуют спектр в целом, так как характер этих зависимостей и величины частот (при одном и том же k) меняются с направлением k . В связи с этим частотный спектр колебаний кристалла обычно описывается поверхностями постоянной частоты $\omega = \omega_i(k)$, относящимися к различным ветвям (i) спектра. Так как форма этих поверхностей меняется при увеличении $|k|$ в результате дисперсии, принято строить совокупность поверхностей постоянной частоты при различных значениях ω для каждой ветви отдельно.

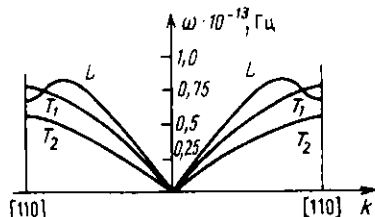


Рис. 23

Выше указывалось, что зависимость частоты ω от волнового вектора k является периодической функцией в k -пространстве, причем величина периода в данном направлении определяется размерами зоны Бриллюэна.

Для цепочки атомов зона Бриллюэна представляет собой отрезок на оси k , расположенный симметрично относительно начала координат. Длина этого отрезка для одноатомной цепочки с периодом a равна $2\pi/a$, для двухатомной с тем же расстоянием между атомами — π/a .

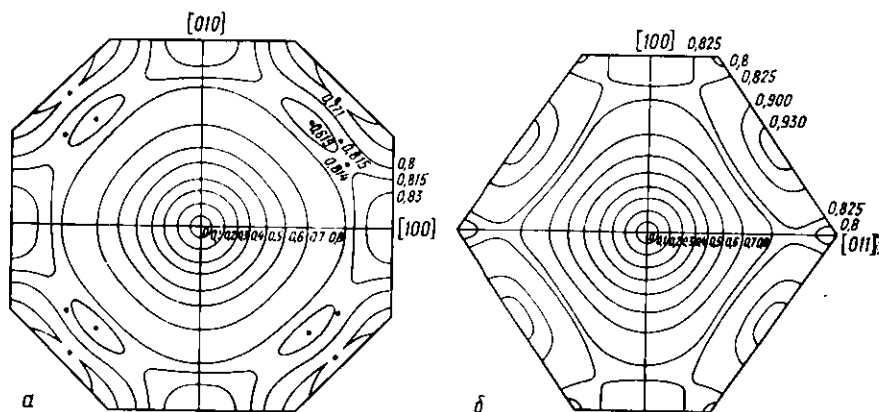
Для двумерных решеток зона Бриллюэна — часть плоскости (k_x, k_y) , расположенная симметрично относительно начала координат и ограниченная замкнутой ломаной линией, соответствующей предельным значениям векторов k в этой плоскости. В частности, для простой квадратной решетки с периодом a зона Бриллюэна — квадрат со стороной $2\pi/a$. Для трехмерных решеток зонами Бриллюэна являются многогранники, центры которых в k -пространстве расположены в начале координат. Форма этих многогранников однозначно определяется симметрией кристаллической решетки*). Наиболее простой вид зона Бриллюэна имеет для простой кубической решетки. Если период решетки равен a , то зона Бриллюэна — куб с центром в начале координат и длиной ребра $2\pi/a$.

*) Методы построения зон Бриллюэна для различных решеток подробно излагаются ниже (часть II, гл. 2, § 2).

Как и для цепочки атомов, трехмерная зона Бриллюэна содержит все физические значения волновых векторов. Поэтому поверхности постоянной частоты, построенные для данной ветви колебаний внутри зоны Бриллюэна, полностью определяют частотный спектр этой ветви. Таким образом, в пространстве волновых векторов частота ω колебаний решетки является периодической функцией, период которой определяется вектором обратной решетки $\mathbf{g}$ (см. часть II, гл. 2, § 3). Для одномерной цепочки атомов $\mathbf{g} = 2\pi/a$.

Если в трехмерном пространстве представить себе мозаику, образованную приложенными друг к другу зонами Бриллюэна, то векторы обратной решетки будут определять периодичность изменения частоты в основных направлениях. Векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} + n\mathbf{g}$, где n — целое число, соответствуют одинаковым значениям частоты и являются физически эквивалентными. Для наглядности обычно проводятся сечения зоны Бриллюэна и поверхностей постоянной частоты различными плоскостями симметрии.

На рис. 24 в качестве примера приведены сечения зоны Бриллюэна и поверхностей постоянной частоты для алюминия плоскостями $[100]$ (а) и $[110]$ (б). Алюминий имеет гранецентрированную кубическую решетку, зона Бриллюэна для которой изображена на рис. 75.



на границе зоны Бриллюэна дисперсия начинает сказываться раньше, чем в направлениях к более удаленным точкам. Для наглядности рассмотрим зону Бриллюэна для простой кубической решетки с периодом a . Ближе всего к центру зоны расположены центры боковых граней куба, более удалены центры ребер и наиболее удалены вершины куба. Дисперсионные кривые для акустических фононов при $k \parallel [100]$ и $k \parallel [110]$ приведены на рис. 25. Различный наклон кривых в области малых частот отражает различие в значениях скоростей звука в этих направлениях.

Для определения формы сечения поверхности постоянной частоты плоскостью $\{010\}$ ($k_z=0$) рассматриваются различные фиксированные значения частоты ω (например, ω_1 , ω_2 , ω_3) и определяются соответствующие им значения волновых векторов для различных направлений в решетке.

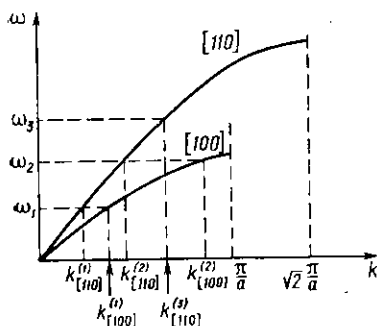


Рис. 25

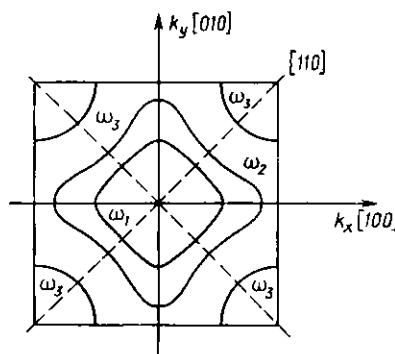


Рис. 26

Для простоты на рис. 25 приведены дисперсионные кривые для двух наиболее характерных направлений в сечении $k_z=0$. Частоте ω_1 соответствует минимальное значение волнового вектора в направлении $[110]$ и максимальное — в направлении $[100]$. Сечение поверхности $\omega_1=\omega_1(k)$ плоскостью $k_z=0$ изображено на рис. 26.

В области малых $|k|$, где закон дисперсии линейен для всех направлений, форма сечения не меняется при увеличении $|k|$ и поверхность постоянной частоты увеличивается, оставаясь подобной самой себе. При некотором значении $|k|$ начинает сказываться дисперсия в направлениях типа $\{100\}$. При этом производная $\frac{\partial \omega}{\partial k_{[100]}}$ уменьшается, что приводит к более сильному возрастанию $|k|$ в направлении $\{100\}$ при одном и том же приращении частоты ω . В результате этого форма сечения поверхности $\omega=\omega(k)$

сильно искажается: поверхность $\omega = \omega(\mathbf{k})$ как бы притягивается к центрам граней зоны Бриллюэна. Характер этого искажения иллюстрируется на рис. 26 кривой для частоты ω_2 .

Из рис. 25 следует, что существует некоторая критическая частота, равная $\omega_{[100]}^{\text{пред}}$, для ветви спектра в направлении $[100]$, при которой поверхность постоянной частоты должна коснуться границ зоны Бриллюэна (см. рис. 26).

Мы уже говорили о том, что групповая скорость бегущей волны в цепочке $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}$ обращается в нуль на границе зоны Бриллюэна. В трехмерном случае направление групповой скорости определяет $\text{grad}_{\mathbf{k}} \omega$, который всегда направлен вдоль внешней нормали к поверхности постоянной частоты.

Отсутствие в кристалле в общем случае строго продольных или строго поперечных волн приводит к тому, что на границе зоны Бриллюэна нормальная компонента групповой скорости может не обращаться в нуль. Однако в направлениях вдоль осей симметрии, когда векторы поляризации колебаний строго параллельны или перпендикулярны $\mathbf{k}$, нормальная к границе компонента групповой скорости всегда обращается в нуль, что сопровождается возникновением стоячей волны. В этих направлениях поверхность постоянной частоты не может касаться границы зоны, так как касание означало бы неравенство нулю нормальной компоненты v_g на границе. По этой причине, как только частота достигает предельного значения вдоль осей симметрии, поверхность постоянной частоты разрывается (кривая для частоты ω_3 на рис. 26). Образующиеся незамкнутые в пределах зоны Бриллюэна куски поверхности $\omega = \omega(\mathbf{k})$, вообще говоря, могут пересекать границу зоны под углами, не обязательно равными 90° , так как направления $\mathbf{k}$ в любой точке на линии пересечения $\omega = \omega(\mathbf{k})$ с границей зоны не являются рациональными (пересечение границы зоны поверхностью постоянной частоты под углом, не равным 90° , означает, что в любой точке на линии пересечения $\text{grad}_{\mathbf{k}} \omega$ направлен под углом к границе зоны и нормальная компонента v_g не равна нулю).

Как указывалось выше, в некоторых случаях частота может достигать максимального значения в точках, расположенных внутри зоны (см. рис. 23). Рассматривая значения $\mathbf{k}$ при фиксированной частоте, близкой по величине к значению частоты в максимуме, нетрудно убедиться, что вокруг этих точек образуются замкнутые поверхности постоянной частоты.

Все отмеченные выше особенности структуры поверхности постоянной частоты для акустических фононов присутствуют в частотном спектре колебаний решетки алюминия, сечения поверхностей постоянной частоты которого представлены на рис. 24.

Построение поверхностей постоянной частоты для оптических фононов — более сложная задача, чем для акустических. Это связано прежде всего с тем, что закон дисперсии оптических колебаний не имеет линейного участка, характерного для акустических

ких ветвей спектра в области малых $|\mathbf{k}|$ (см. рис. 17, 19, б, в). Области наиболее сильной дисперсии оптических фононов расположены вблизи нулевого и максимальных значений вектора $\mathbf{k}$ в зоне Бриллюэна.

Процедура построения поверхностей $\omega^{\text{опт}} = \omega^{\text{опт}}(\mathbf{k})$ для оптических фононов аналогична рассмотренной выше: выбираются наиболее характерные направления в зоне Бриллюэна и для них строятся зависимости $\omega_i^{\text{опт}} = \omega_i^{\text{опт}}(\mathbf{k})$. Проводятся сечения $\omega = \text{const}$ и находятся для выбранных направлений значений $|\mathbf{k}|$, которые определяют анизотропию поверхности постоянной частоты.

Рассмотрим некоторые особенности оптических колебаний в кристалле с объемно-центрированной кубической решеткой с периодом a , у которой масса центрального атома отличается от массы атомов, расположенных в вершинах элементарной ячейки (рис. 27). Зона Бриллюэна для ОЦК-решетки изображена на рис. 73. Ее форма и размеры не зависят от того, состоит ли она из атомов одного сорта или масса центрального атома отличается от массы остальных, так как при изменении массы центрального атома основные периоды трансляции не меняются (периодичность расположения в пространстве атомных плоскостей сохраняется).

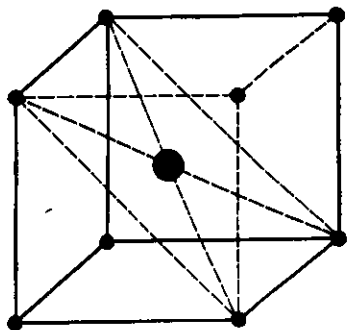


Рис. 27

Обратим внимание на то, что удвоение периода в цепочке, состоящей из атомов двух сортов, возникло в результате перехода от одноатомной цепочки (с одним атомом в элементарной ячейке) к двухатомной (с двумя атомами в элементарной ячейке). ОЦК-решетка в отличие от цепочки имеет два атома в элементарной ячейке, и поэтому увеличение массы центральных атомов не изменит числа атомов в элементарной ячейке. Удобно выделить в ОЦК-решетке две простые кубические подрешетки с периодом a , образованные легкими и тяжелыми атомами соответственно, что позволяет описать картину оптических колебаний более наглядно.

Наиболее простым является случай, когда волновой вектор направлен вдоль одной из осей типа $[100]$. Такому направлению волнового вектора соответствуют три типа оптических колебаний: продольные L , в которых атомы смещаются вдоль направления $\mathbf{k}$, и поперечные T_1 и T_2 , в которых векторы поляризации колебаний атомов перпендикулярны $\mathbf{k}$ и направлены вдоль кристаллографических осей $[010]$ и $[100]$. Направление $[100]$ является осью симметрии четвертого порядка, и поэтому частоты $\omega_{T_1}^{\text{опт}}$ и $\omega_{T_2}^{\text{опт}}$ поперечных колебаний совпадают при любых значениях вектора $|\mathbf{k}|$, так что ветвь спектра $\omega_j^{\text{опт}}(\mathbf{k})$ дважды вырождена.

Простота рассматриваемого случая заключается в том, что здесь атомы в каждой из атомных плоскостей, перпендикулярных $\mathbf{k}$, колеблются синфазно. Поэтому картина оптических колебаний в ОЦК-решетке при ориентации $\mathbf{k}$ вдоль осей четвертого порядка аналогична картине оптических колебаний в двухатомной цепочке, если вместо чередующихся легких и тяжелых атомов рассматривать чередующиеся с периодом $a/2$ атомные плоскости, образованные легкими и тяжелыми атомами соответственно.

При $|\mathbf{k}|=0$ соседние атомные плоскости колеблются в противофазе, что эквивалентно колебанию в противофазе двух подрешеток. Частота таких колебаний из соображений симметрии (см. рис. 27) одна и та же для продольных и поперечных волн (следует иметь в виду, что атомные «легкие» и «тяжелые» плоскости сдвинуты относительно друг друга в направлениях $[010]$ и $[001]$ на расстояния $a/2$). Поэтому при $|\mathbf{k}|=0$ частоты во всех ветвях колебаний совпадают: $\omega_{T_1}^{\text{опт}} = \omega_{T_2}^{\text{опт}} = \omega_L^{\text{опт}}$. При $|\mathbf{k}| \neq 0$ вырождение снимается. Дело в том, что при $|\mathbf{k}|=0$ ($\lambda=\infty$), когда обе подрешетки колеблются в противофазе, изменяются расстояния только между атомами, расположенными в разных подрешетках, в то время как расстояния между атомами в каждой из подрешеток остаются неизменными. При колебаниях с длинами волн, превышающими $2a$, изменяются расстояния не только между атомами различных подрешеток, но и в каждой подрешетке. Ввиду того что упругие модули, определяющие сжатие и сдвиг в подрешетках, не равны между собой (модуль сжатия всегда превышает модуль сдвига), частота продольных колебаний становится больше двух одинаковых частот поперечных колебаний: $\omega_L^{\text{опт}} > \omega_{T_1}^{\text{опт}} = \omega_{T_2}^{\text{опт}}$.

Вблизи предельных значений волнового вектора $\mathbf{k}$ в зоне Бриллюэна в оптических ветвях спектра происходит уменьшение амплитуды колебаний «тяжелых» атомных плоскостей по сравнению с амплитудой колебаний «легких» атомных плоскостей. Наконец, при $\mathbf{k}=\mathbf{k}^{\text{пред}}$ соседние плоскости, образованные легкими атомами, колеблются в противофазе относительно неподвижных плоскостей, образованных тяжелыми атомами, создавая области сжатия и разряжения в продольной волне и не изменяя плотности (в первом приближении) — в поперечной. При этом, очевидно, $\omega_L^{\text{опт}}$ остается больше $\omega_{T_1}^{\text{опт}} = \omega_{T_2}^{\text{опт}}$.

Частота колебаний при $|\mathbf{k}|=0$ всегда больше соответствующей частоты оптических колебаний при $\mathbf{k}=\mathbf{k}^{\text{пред}}$, так как колебания подрешеток относительно друг друга при $|\mathbf{k}|=0$ эквивалентны колебаниям соседних атомных плоскостей в противофазе (с $\lambda=\infty$), а колебаниям при $\mathbf{k}=\mathbf{k}^{\text{пред}}$ соответствует длина волны $2a$.

При любых других ориентациях волнового вектора характер оптических колебаний сильно усложняется. Это связано прежде всего с тем, что в общем случае нарушается условие параллельности вектора $\mathbf{k}$ вектору поляризации колебаний атомов в продольной волне и условие ортогональности $\mathbf{k}$ векторам поляризации смещений атомов в поперечных волнах. Существуют лишь

только отдельные направления, в которых эти условия выполняются. В ОЦК-решетке одним из направлений является $[110]$. В ориентации $[110]$ волновой вектор направлен вдоль диагонали боковой грани куба. При такой ориентации $\mathbf{k}$ оптические колебания поляризованы следующим образом: продольные L — в направлении $[110]$, поперечные — в двух взаимно перпендикулярных направлениях: вдоль оси $[001]$ (T_1) и $[110]$ (T_2). Направление $[110]$ является осью симметрии второго порядка, и поэтому частоты $\omega_{T_1}^{\text{опт}}$ и $\omega_{T_2}^{\text{опт}}$ поперечных колебаний не равны между собой. Поскольку расстояния $a/2$ между атомными плоскостями в направлении $[001]$ меньше расстояний $a/\sqrt{2}$ между атомными плоскостями для направления $[110]$, частота поперечных колебаний $\omega_{T_1}^{\text{опт}}$ обычно превышает частоту $\omega_{T_2}^{\text{опт}}$.

Следует подчеркнуть, что для появления оптических колебаний не обязательно, чтобы решетка состояла из атомов разной массы. Существенно лишь, чтобы положение всех атомов в решетке не было бы одинаковым, что позволяет выделить две (или более) подрешетки, в которых силовые постоянные различны. Такая ситуация имеет место в решетках с двумя (или более) атомами в элементарной ячейке, независимо от того одинаковы эти атомы или нет. Поэтому интерпретировать возникновение оптических ветвей спектра в трехмерной решетке как результат удвоения периода и появления новых границ зоны Бриллюэна (см. рис. 19, б, в) не всегда возможно.

Таким образом, полное представление о частотном спектре колебаний решетки дает совокупность $3j$ (j — число атомов в элементарной ячейке) поверхностей постоянной частоты, построенных отдельно для всех ветвей спектра: трех акустических и $(3j - 3)$ оптических. Построение этих поверхностей для реальных кристаллов является чрезвычайно сложной задачей. В настоящее время поверхности постоянной частоты теоретически построены только для отдельных веществ.

§ 2. СПЕКТРАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ АКУСТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ

Выше указывалось, что энергетический спектр фононов в реальных веществах очень сложен и для его описания необходимо знать детальный вид поверхностей постоянной частоты $\omega(\mathbf{k}) = \text{const}$ в зоне Бриллюэна для всех ветвей спектра $i=1, 2, \dots, 3j$. Поверхности постоянной частоты определяют очень важную интегральную характеристику фононного спектра — функцию $D(\omega)$ спектральной плотности фононов, задающую распределение числа фононов с различными энергиями на шкале частоты:

$$D(\omega) = \frac{dn}{d\omega}, \quad (3.1)$$

где n — общее число состояний во всех ветвях спектра акустических и оптических колебаний для данной частоты

$$n(\omega) = n_L^{\text{ак}} + n_{T_1}^{\text{ак}} + n_{T_2}^{\text{ак}} + n_L^{\text{опт}} + n_{T_1}^{\text{опт}} + n_{T_2}^{\text{опт}}. \quad (3.2)$$

Из соотношений (3.1) и (3.2) следует, что полную спектральную плотность фоонов $D(\omega)$ можно разбить на парциальные плотности $D_i(\omega)$, каждая из которых относится к одной ветви в спектре колебаний ($i=1, 2, \dots, 3j$):

$$D(\omega) = \sum_{i=1}^{3j} \frac{dn_i(\omega)}{d\omega} = \sum_{i=1}^{3j} D_i(\omega). \quad (3.3)$$

Суммирование ведется по всем ветвям спектра.

Таким образом, функция $D(\omega)$ является аддитивной функцией, и ее удобно строить, рассматривая функции $D_i(\omega)$ в отдельности. Каждая функция $D_i(\omega)$ при этом определяет число состояний (число волновых векторов), приходящихся на единичный интервал частот в i -й ветви спектра колебаний.

Как следует из самого определения функции плотности состояний, интеграл $\int_0^{\infty} D(\omega) d\omega$ должен быть равен полному числу разрешенных состояний в спектре (в зоне Бриллюэна).

Для одноатомной решетки размерами L_x, L_y, L_z и с периодами a, b, c по осям x, y, z соответственно проекции волновых векторов колебаний определяются выражениями, аналогичными (2.21):

$$\begin{aligned} k_{q_x} &= \frac{2\pi}{L_x} q_x; \quad q_x = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{L_x}{2a}; \\ k_{q_y} &= \frac{2\pi}{L_y} q_y; \quad q_y = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{L_y}{2b}; \\ k_{q_z} &= \frac{2\pi}{L_z} q_z; \quad q_z = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{L_z}{2c}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Разрешенные значения векторов $\mathbf{k}$ заполняют прямоугольный параллелепипед объемом $\frac{(2\pi)^3}{abc}$, являющийся зоной Бриллюэна для прямоугольной решетки (рис. 28). Элементарный объем, приходящийся на одно состояние, соответствующее одному из разрешенных значений волнового вектора, равен $\frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V}$, где V — объем кристалла.

Число различных состояний в зоне Бриллюэна равно отношению

$$\frac{(2\pi)^3}{abc} \bigg/ \frac{(2\pi)^3}{V} = V/abc$$

объема зоны и элементарного объема и совпадает с числом N атомов в решетке. Напомним, что каждый волновой вектор в решетке рассматриваемого типа определяют три акустические волны,

отличающиеся поляризацией. Поэтому общее число волн акустического типа, соответствующих полному объему зоны Бриллюэна, равно $3N$. Это заключение справедливо для всех одноатомных решеток. Нетрудно убедиться, что для решеток с размерностью R число состояний в зоне равно RN .

Посмотрим, как изменится этот результат при наличии двух (в общем случае нескольких) атомов в элементарной ячейке.

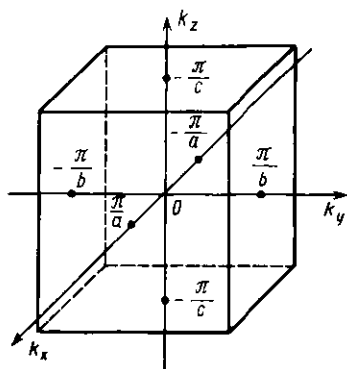


Рис. 28

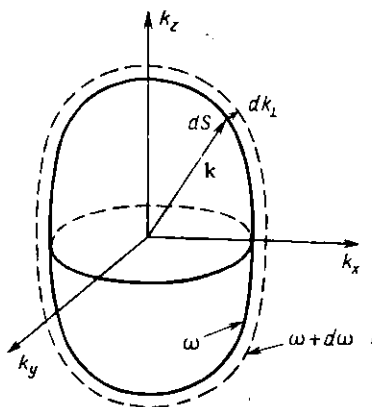


Рис. 29

У цепочки атомов изменение массы каждого четного (переход к цепочке с двумя атомами в элементарной ячейке) приводит к удвоению периода (см. § 3 гл. 2) и уменьшению размера зоны Бриллюэна вдвое: от $2\pi/a$ до π/a . Разрешенные значения волновых векторов $k_q = \frac{2\pi}{L} q$ и минимальные расстояния $2\pi/L$ между ними при этом не изменяются. В результате число разрешенных состояний волновых векторов в зоне уменьшается вдвое, так как становится равным числу $N/2$ элементарных ячеек в цепочке. Однако одновременно появляется новая — оптическая — ветвь колебаний, так что общее число состояний в двух ветвях спектра $\frac{N}{2} + \frac{N}{2} = N$.

Для рассмотренной выше кубической объемно-центрированной решетки объем зоны Бриллюэна равен $2 \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3$, а элементарный объем, приходящийся на одно разрешенное состояние волнового вектора, — $(2\pi)^3/V$. Число состояний в зоне $2 \left(\frac{2\pi}{a} \right)^3 / \frac{(2\pi)^3}{V} = 2 \frac{N}{2}$ (объем элементарной ячейки ОЦК-решетки с векторами $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$ и $\left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, \frac{a}{2} \right)$ равен $\frac{a^3}{2}$), т. е. также равняется числу элементарных ячеек в кристалле. Для трехмерной решетки с двумя атомами в элементарной ячейке каждое разрешенное значение

k определяет шесть значений частот колебаний в шести ветвях спектра: трех акустических и трех оптических. Общее число частот в спектре равно $3j \frac{N}{j} = 3N$. В общем случае для решеток размерности R

$$\int_0^\infty D(\omega) d\omega = RN, \quad (3.5)$$

т. е. нормировка не зависит от числа j атомов в элементарной ячейке. Число состояний в каждой ветви спектра равно общему числу состояний RN , деленному на число $R \cdot j$ ветвей в спектре, т. е. N/j , так что

$$\int_0^\infty D_i(\omega) d\omega = \frac{N}{j}. \quad (3.6)$$

Функция $D_i = \frac{dn_i}{d\omega}$ однозначно определяется законом дисперсии $\omega_i(k)$ для i -й ветви спектра, который характеризуется совокупностью поверхностей постоянной частоты в зоне Бриллюэна.

Чтобы получить общее выражение для $D_i(\omega)$, нужно вычислить изменение dn_i числа состояний при изменении частоты на $d\omega$. Рассмотрим с этой целью две поверхности $\omega_i(k) = \text{const}$ и $\omega_i(k) + d\omega = \text{const}$ (рис. 29) и определим объем, заключенный между ними. Выделим на поверхности $\omega_i(k) = \text{const}$ элементарную площадку dS , положение которой задается вектором k . Соответствующий ей элементарный объем, заключенный между двумя поверхностями, равен $dS dk_\perp$, где $dk_\perp$ — расстояние между поверхностями в точке k .

Весь объем Δ между поверхностями выражается интегралом по поверхности и имеет вид

$$\Delta = \int_{S_\omega} dS dk_\perp.$$

Используя выражение $v_g(k) = \frac{d\omega}{dk_\perp}$, находим

$$\Delta = \int_{S_\omega} dS dk_\perp = \int_{S_\omega} \frac{d\omega dS}{|v_g(k)|},$$

$d\omega$ можно вынести за знак интеграла, так как оно не зависит от k . Тогда

$$\Delta = d\omega \int_{S_\omega} \frac{dS}{|v_g(k)|}.$$

Объем, приходящийся на одно состояние в пространстве волновых чисел, равен $\frac{(2\pi)^3}{V}$ (V — объем кристалла), и, следовательно,

$$dn = \frac{\Delta}{(2\pi)^3} V = \frac{V}{(2\pi)^3} d\omega \int_{S_\omega} \frac{dS}{|v_g'(k)|},$$

откуда

$$D_i(\omega) = \frac{dn_i}{d\omega} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{S_{\omega_i}} \frac{dS}{|v_{gi}(k)|}. \quad (3.7)$$

Интегрирование ведется по замкнутой поверхности S_{ω_i} для i -й ветви спектра, соответствующей частоте ω . Для высоких частот, близких к предельным частотам в спектре, поверхность S_{ω_i} может быть незамкнутой (см. рис. 24, 26). В этом случае разрывы поверхности на границах зоны заполняются кусками плоскостей, ограничивающих зону Бриллюэна.

Учитывая, что каждая ветвь спектра акустических колебаний ограничена сверху по частоте предельным значением $\omega_i^{\text{пред}}$, функцию парциальной плотности состояний в трехмерном кристалле можно определить следующим образом:

$$D_i^{\text{III}}(\omega) = \begin{cases} \frac{V}{(2\pi)^3} \oint_{S_{\omega_i}} \frac{dS}{|v_g(k)|} & \text{при } \omega \leq \omega_i^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_i^{\text{пред}}. \end{cases} \quad (3.8)$$

Предельное значение $\omega_i^{\text{пред}}$ частоты находится из условия нормировки (3.6), если известен закон дисперсии $\omega_i = \omega_i(k)$.

Проводя аналогичные рассуждения для случая двух- и одномерных кристаллов, нетрудно получить выражения для $D_i^{\text{II}}(\omega)$ и $D_i^{\text{I}}(\omega)$:

$$D_i^{\text{II}}(\omega) = \begin{cases} \frac{S}{(2\pi)^2} \oint_{\mathcal{L}_{\omega_i}} \frac{dL}{|v_g(k)|} & \text{при } \omega \leq \omega_i^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_i^{\text{пред}}; \end{cases} \quad (3.9)$$

$$D_i^{\text{I}}(\omega) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi} \frac{1}{|v_g(k)|} & \text{при } \omega \leq \omega^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega^{\text{пред}}, \end{cases} \quad (3.10)$$

где S — площадь двумерного кристалла; $\mathcal{L}_{\omega_i}$ — контур (линия) постоянной частоты ω для i -й ветви спектра (для замыкания которого в случае необходимости включаются куски границы зоны Бриллюэна); $d\mathcal{L}$ — элемент линии постоянной частоты; $v_g(k)$ — нормальная составляющая скорости в текущей точке на контуре $\mathcal{L}_{\omega_i}$; L — размер одномерного кристалла; $v_g(k)$ — скорость фононов в одномерной цепочке.

Для оптических фононов функции $D_i(\omega)$ определены в интервалах $\omega_{\min_i} < \omega < \omega_{\max_i}$. При $\omega > \omega_{\max_i}$ и при $\omega < \omega_{\min_i}$ $D_i(\omega)$ оптических фононов равны нулю.

Вычисление функции $D(\omega) = \sum_{i=1}^{3j} D_i(\omega)$ в общем случае является очень сложной задачей. Однако знание точного вида $D(\omega)$ и в особенности положения максимумов этой функции на шкале частот оказывается весьма важным при интерпретации различных физических эффектов в твердом теле (например, при исследовании магнетоакустических резонансов, вольт-амперных характеристик туннельных переходов, в мессбауэровской спектроскопии, сверхпроводимости и т. д.).

Представление об общем виде функции $D(\omega)$ можно получить, рассматривая сначала простейшую модель спектра, для которой функцию $D(\omega)$ можно вычислить строго, а затем ввести поправки, качественно учитывающие рассмотренные выше особенности фононного спектра в реальных кристаллах.

Простейшей моделью, для которой функция спектральной плотности акустических фононов может быть вычислена точно, является модель изотропного кристалла (в котором $v_{зв \perp 1} = v_{зв \perp 2}$ и $v_{зв \parallel}$ не зависят от направления $\mathbf{k}$) без дисперсии со сферической зоной Бриллюэна (т. е. с одними и теми же значениями $k^{\text{пред}}$ и $\omega_i^{\text{пред}}$ для всех направлений). Однако такая модель является чистой абстракцией. Ни одно из сделанных предположений неприменимо даже к простой кубической решетке.

Энергетический спектр такой модели однозначно описывается двумя ветвями для акустических продольных и поперечных колебаний:

$$\begin{aligned}\omega_{\parallel} &= v_{зв \parallel} |\mathbf{k}|, \\ \omega_{\perp 1} &= \omega_{\perp 2} = v_{зв \perp} |\mathbf{k}|,\end{aligned}$$

одна из которых дважды вырождена (рис. 30). Поверхности постоянной частоты — сферы с радиусами

$$k_{\parallel} = \omega_{\parallel} / v_{зв \parallel} \text{ и } k_{\perp} = \omega_{\perp} / v_{зв \perp}.$$

В этом случае $|v_{\mathbf{k}}| = \text{const}$ и интеграл (3.8) по поверхности постоянной частоты равняется площади сферы. Выражение для $D_i(\omega)$ принимает простой вид:

$$D_i^{\text{III}}(\omega) = \begin{cases} \frac{V\omega^2}{2\pi^2 (v_{зв i})^3} & \text{при } \omega \leq \omega_i^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_i^{\text{пред}}. \end{cases} \quad (3.11)$$

Значение предельной частоты находится из условия нормирования (3.6) парциальной функции $D_i(\omega)$. Оно сводится к равенству

$$\frac{V (\omega_i^{\text{пред}})^3}{6\pi^2 (v_{\text{зв}i})^3} = N,$$

откуда

$$\omega_i^{\text{пред}} = v_{\text{зв}i} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} = v_{\text{зв}i} k^{\text{пред}}. \quad (3.12)$$

Предельные значения частот зависят от скорости распространения колебаний и различны для разных ветвей спектра:

$$\omega_{\parallel}^{\text{пред}} > \omega_{\perp 1}^{\text{пред}} = \omega_{\perp 2}^{\text{пред}}.$$

Заметим, что условие нормировки (3.6) эквивалентно условию, что полное число разрешенных состояний внутри сферы радиуса $k^{\text{пред}}$ равно числу колебательных мод в одной из ветвей спектра:

$$\frac{\frac{4}{3} \pi (k^{\text{пред}})^3}{(2\pi)^3} V = N. \quad (3.13)$$

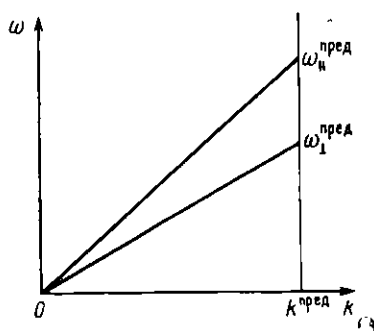


Рис. 30

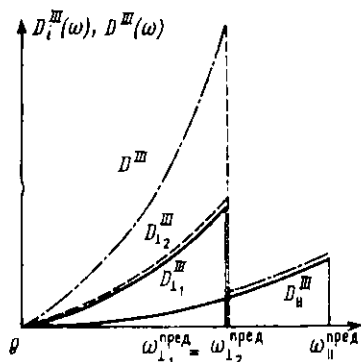


Рис. 31

Графики функций $D_i^{\text{III}}(\omega)$ изображены на рис. 31. В результате вырождения поперечных ветвей спектра ($v_{\text{зв}\perp 1} = v_{\text{зв}\perp 2}$) функций $D_{\perp 1}^{\text{III}}(\omega)$ и $D_{\perp 2}^{\text{III}}(\omega)$ идентичны. Здесь же штрихпунктиром показана полная плотность $D^{\text{III}}(\omega)$, равная сумме

$$D_{\parallel}^{\text{III}}(\omega) + 2D_{\perp}^{\text{III}}(\omega).$$

Обратим внимание на то, что скорость возрастания плотности состояний в каждой ветви спектра очень сильно зависит от величины соответствующей скорости звука (в коэффициент при ω^2 скорость звука входит в 3-й степени). Поэтому чем больше $v_{\text{зв}i}$, тем выше идет кривая $D_i^{\text{III}}(\omega)$.

Из формул (3.11) и (3.12) следует, что

$$D_i^{\text{III}}(\omega_i^{\text{пред}}) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{2/3} \frac{1}{v_{\text{зв}i}}$$

и обратно пропорциональна $v_{\text{зв}i}$. Поэтому пик функции $D_{\perp}^{\text{III}}$ выше, чем пик функции $D_{\parallel}^{\text{III}}$. По существу, это является отражением того факта, что площади под кривыми $D_i(\omega)$ должны быть равны между собой.

Результирующая функция $D^{\text{III}}(\omega)$ имеет два четко выраженных максимума, соответствующих наибольшей плотности состояний поперечных и продольных фононов.

Для рассматриваемой модели можно также легко получить аналитическое выражение для плотности состояний в двумерной решетке

$$D_i^{\text{II}}(\omega) = \begin{cases} \frac{S\omega}{2\pi v_{\text{зв}i}^2} & \text{при } \omega \leq \omega_i^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega_i^{\text{пред}}. \end{cases} \quad (3.14)$$

Из условия нормировки

$$\omega_i^{\text{пред}} = v_{\text{зв}i} \sqrt{4\pi \frac{N}{S}}.$$

Графики функций $D_i^{\text{II}}(\omega)$ показаны на рис. 32, штрихпунктирная кривая изображает полную плотность состояний

$$D^{\text{II}}(\omega) = D_{\parallel}^{\text{II}}(\omega) + D_{\perp}^{\text{II}}(\omega).$$

Аналогично для одномерной цепочки

$$D^{\text{I}}(\omega) = \begin{cases} \frac{L}{2\pi v_{\text{зв}}} & \text{при } \omega \leq \omega^{\text{пред}}, \\ 0 & \text{при } \omega > \omega^{\text{пред}}; \end{cases} \quad (3.15)$$

$$\omega^{\text{пред}} = v_{\text{зв}} \cdot k^{\text{пред}} = v_{\text{зв}} \cdot \frac{\pi}{a}.$$

Плотность акустических фононов у одномерных структур, без учета дисперсии, не зависит от частоты.

Рассмотренная модель является единственной, для которой выражения для плотности состояний могут быть получены в простой аналитической формуле. В действительности, как уже говорилось, эта модель далека от реальности.

Прежде всего у реальных кристаллов не существует одного определенного значения $k^{\text{пред}}$, так как разрешенные значения волновых векторов заполняют не сферу, а зону Бриллюэна, имеющую форму многогранника. Вследствие этого зависимости ω от k обрываются при значениях $|k|$, определяющих расстояние от центра зоны до ее границ в данном направлении. Будем, однако, по-

прежнему считать, что среда изотропна и закон дисперсии линейен во всех направлениях (дисперсия отсутствует).

Представим себе, что вся поверхность зоны Бриллюэна разделена на небольшие участки, каждый из которых является основанием узкой пирамиды с вершиной в центре зоны. Совокупность таких пирамид заполняет весь объем зоны Бриллюэна. Каждой пирамиде соответствует определенное значение $k^{\text{пред}}$ (для удобства считаем, что объемы всех элементарных пирамид одинаковы).

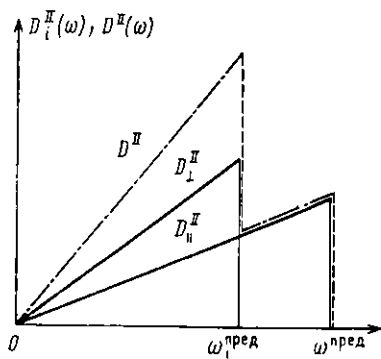


Рис. 32

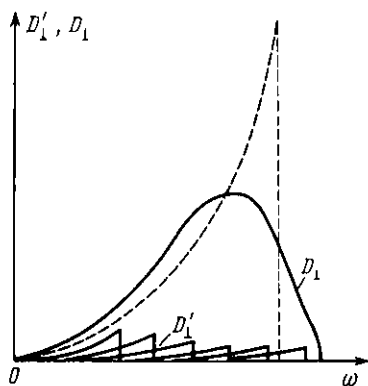


Рис. 33

Выберем какую-нибудь одну ветвь спектра, например $\omega_{\perp}(k)$. Для каждого конуса закон дисперсии описывается выражением (2.20), а $k^{\text{пред}}$ определяется расстоянием от центра до границы зоны в соответствующем направлении. Зависимость $D_{\perp}$ от ω имеет вид (3.11) и обрывается при $k=k^{\text{пред}}$. Так как площади под всеми элементарными кривыми $D'_{\perp}(\omega)$ одинаковы, кривые $D'_{\perp}$ от ω для больших $k^{\text{пред}}$ идут более полого и им соответствуют меньшие значения $D'(\omega^{\text{пред}})$. Несколько таких элементарных кривых $D'_{\perp}(\omega)$ из интервала $k_{\text{min}}^{\text{пред}} \leq |k| \leq k_{\text{max}}^{\text{пред}}$ и соответственно $\omega_{\text{min}}^{\text{пред}} \leq \omega \leq \omega_{\text{max}}^{\text{пред}}$ изображены на рис. 33.

Функция $D_{\perp}(\omega)$, являющаяся суммой всех элементарных зависимостей $D'_{\perp}(\omega)$, изображена на рис. 33 сплошной линией (пунктирная кривая на этом рисунке соответствует простейшей модели изотропного кристалла (формула (3.11))).

Характерными отличиями построенной таким образом функции плотности состояний являются пологий максимум, расположенный внутри интервала частот $0 \leq \omega \leq \omega_{\text{max}}^{\text{пред}}$, и монотонное уменьшение плотности состояний при приближении частоты к значению для данной ветви в зоне.

Появление плавного спадающего (после максимума) участка на кривой $D(\omega)$ связано со следующим. В центральной области

зоны Бриллюэна рост числа dn состояний при увеличении частоты на $d\omega$ происходит по все увеличивающейся поверхности постоянной частоты, что приводит к росту $D(\omega)$. Однако по мере приближения к границам зоны поверхность постоянной частоты разрывается на отдельные куски (см. рис. 24, 26), общая площадь которых постепенно уменьшается при возрастании частоты и обращается в нуль, когда ω достигает предельного значения. Соответственно уменьшаются dn (при тех же $d\omega$) и величина плотности состояний.

Таким образом, монотонное уменьшение функции $D(\omega)$ при $\omega \rightarrow \omega^{\text{пред}}$ является следствием особенностей расположения поверхностей постоянной частоты в зоне Бриллюэна и зависит от ее формы.

Учтем теперь анизотропию реальных кристаллов, пренебрегая по-прежнему дисперсией. Анизотропия выражается в том, что скорость звука зависит от направления волнового вектора $\mathbf{k}$ и скорости поперечных волн в общем случае различаются.

Посмотрим, как при этом изменятся кривые, построенные на рис. 33. Скорость звука в пределах каждой элементарной пирамиды можно считать постоянной, так что элементарные зависимости D' от ω по-прежнему описываются выражением (3.11), но с различными для разных пирамид значениями скоростей. В результате сместятся предельные значения частот для каждой пирамиды ($\omega^{\text{пред}} = v_{\text{зв}} k^{\text{пред}}$) и по-разному изменятся соответствующие коэффициенты при ω^2 в выражении для $D_i(\omega)$. Однако эти изменения могут привести лишь к некоторой деформации кривой $D_i(\omega)$, не изменяя ее общего вида.

Наличие двух скоростей для поперечных волн с разной поляризацией приведет к снятию вырождения кривых $D_{\perp}(\omega)$ и появлению двух различных зависимостей $D_{\perp_1}$ и $D_{\perp_2}$ от ω с различными значениями предельной частоты у каждой ветви спектра.

Учет дисперсии приводит к дальнейшему изменению формы кривой $D(\omega)$. Выше указывалось, что по мере приближения к границе зоны Бриллюэна групповая скорость возбуждений $\frac{\partial \omega}{\partial k}$

уменьшается, хотя для реальных решеток она не обязательно обращается в нуль на границе зоны. Тем не менее уменьшение скорости является весьма существенным обстоятельством, которое изменяет форму кривой $D(\omega)$ во всей области частот.

Из формул (3.8)–(3.10) следует, что уменьшение скорости приводит к увеличению плотности фононных состояний. Причину возрастания $D(\omega)$ в результате дисперсии легко понять. Уменьшение скорости $\frac{\partial \omega}{\partial k}$ означает, что при одном и том же изменении частоты $d\omega$ величина изменения волнового вектора dk увеличивается и, таким образом, увеличивается толщина слоя, заключенного между двумя поверхностями постоянной частоты, для которых ω отличается на величину $d\omega$. Поскольку плотность состояний

в k -пространстве постоянна, то увеличение объема слоя приводит к увеличению dn и, следовательно, $D(\omega)$. Из нормировки функции $D(\omega)$ следует, что увеличение плотности состояний вблизи $\omega_{\text{пред}}$ должно приводить к уменьшению плотности в области меньших частот. Кривая $D(\omega)$ с учетом дисперсии становится более полой в области малых частот, а ее максимум смещается вправо (в результате возрастающего влияния дисперсии при приближении к границе зоны) и становится более резким. В точках зоны, где $\frac{\partial \omega}{\partial k} = 0$, плотность состояний обращается в бесконечность. Реально это приводит к появлению узких пиков на кривой $D(\omega)$. Очевидно, что все сказанное относится ко всем трем ветвям спектра акустических фононов: $\omega_{\parallel}(k)$, $\omega_{\perp 1}(k)$ и $\omega_{\perp 2}(k)$.

Результирующая функция спектральной плотности получается путем сложения функций $D_{\parallel}(\omega)$, $D_{\perp 1}(\omega)$ и $D_{\perp 2}(\omega)$ (рис. 34, а). Результат сложения представлен на рис. 34, б. Для сравнения

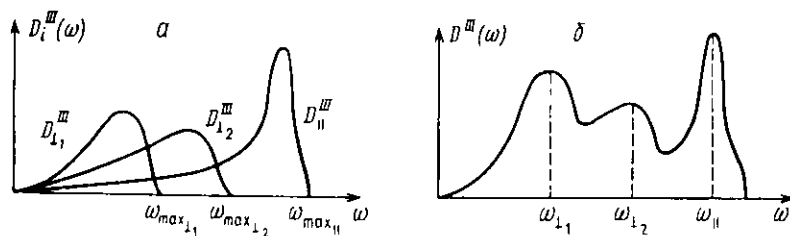


Рис. 34

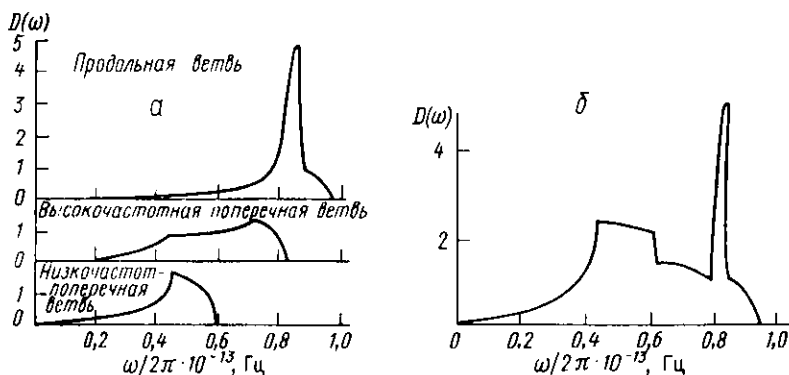


Рис. 35

на рис. 35 показаны функции плотности фононных состояний для алюминия, вычисленные Уолкером (рис. 35, а — парциальные функции $D_{\parallel}$, $D_{\perp 1}$, $D_{\perp 2}$; рис. 35, б — полная функция $D(\omega)$).

Таким образом, функция спектральной плотности для акустических фононов изображается кривой, имеющей три обычно дос-

таточно четко выраженных максимума. Левый относится к низкочастотным поперечным фононам, средний — к высокочастотным поперечным фононам, правый — к продольным фононам. Положению каждого пика соответствуют характерные значения частот. В этом смысле принято говорить о частотах поперечных и продольных фононов, предполагая, что большим группам фононов, соответствующих максимумам на кривой $D(\omega)$, можно приписать определенные значения частот. Кроме того, фононный спектр характеризуется также значением частоты $\omega^{\text{пред}}$, при которой плотность фононных состояний обращается в нуль.

§ 3. ОСОБЕННОСТИ ВАН ХОВА

Сравнивая кривые для плотности состояний на рис. 34, б и 35, б, нетрудно заметить их качественное сходство. Однако точный расчет дает кривую с резкими изломами, которые нельзя получить в результате проведенного выше рассмотрения. Дело заключается в том, что изломы на кривой $D(\omega)$ являются следствием особенностей в плотности состояний, которые возникают на частотах, соответствующих значениям частоты в критических точках в зоне Бриллюэна. Характерной особенностью критических точек является то, что в них обращается в нуль групповая скорость фононов $v_g = \text{grad}_k \omega$, которая стоит в знаменателе в формулах (3.8) — (3.10). Существует только четыре типа критических точек. Два из них — это экстремальные точки, в которых зависимости частоты ω от k имеют локальный минимум или максимум (см. рис. 23 и 24). Кроме них критическими являются два типа седловых точек: точки, в которых при увеличении ω образуется перемычка между двумя изолированными поверхностями постоянной частоты, и точки, в которых при тех же условиях происходит разрыв перемычки (см. рис. 24).

Рассмотрим подробнее, какие особенности плотности состояний возникают в критических точках.

Начнем с трехмерного случая и разложим в окрестности критической точки зависимость частоты от волнового вектора в ряд Тейлора по степеням отклонения k от его значения k_0 в критической точке.

Ограничиваясь членами второго порядка по компонентам вектора $k - k_0$, получим

$$\omega = \omega_0 + \alpha_x (k_x - k_{0x})^2 + \alpha_y (k_y - k_{0y})^2 + \alpha_z (k_z - k_{0z})^2, \quad (3.16)$$

где ω_0 — значение частоты в критической точке. В (3.16) линейные члены по $(k - k_0)$ отсутствуют, так как при $k = k_0$ $\text{grad}_k \omega = 0$.

Коэффициенты α_x , α_y , α_z при членах второго порядка имеют один и тот же знак и положительны, если функция $\omega(k)$ имеет в точке $k = k_0$ локальный минимум, и отрицательны, если в этой точке — локальный максимум. Как в том, так и в другом случае квадратичная форма (3.16) представляет собой уравнение

поверхности постоянной частоты в зоне Бриллюэна в виде трехосного эллипсоида. В окрестности точки минимума полуоси эллипсоида a , b , c равны

$$a = \left(\frac{\omega - \omega_0}{\alpha_x} \right)^{1/2}, \quad b = \left(\frac{\omega - \omega_0}{\alpha_y} \right)^{1/2}, \quad c = \left(\frac{\omega - \omega_0}{\alpha_z} \right)^{1/2}. \quad (3.17)$$

В окрестности точки максимума полуоси эллипсоида равны

$$a = \left(\frac{\omega_0 - \omega}{-\alpha_x} \right)^{1/2}, \quad b = \left(\frac{\omega_0 - \omega}{-\alpha_y} \right)^{1/2}, \quad c = \left(\frac{\omega_0 - \omega}{-\alpha_z} \right)^{1/2}. \quad (3.18)$$

Объем Ω_ω в зоне Бриллюэна, ограниченный поверхностью постоянной частоты для окрестности минимума и максимума, можно записать в виде

$$\Omega_\omega = \frac{4}{3} \pi abc = \frac{4}{3} \pi \frac{|\omega - \omega_0|^{3/2}}{(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y| \cdot |\alpha_z|)^{1/2}}. \quad (3.19)$$

Число фоновых состояний N внутри объема Ω_ω составляет $V\Omega_\omega/(2\pi)^3$, отсюда добавка $\Delta D^{\text{III}}(\omega)$ к общей плотности состояний, возникающая вблизи точки локального экстремума,

$$\Delta D^{\text{III}}(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{V}{(2\pi)^2} \frac{|\omega - \omega_0|^{1/2}}{(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y| \cdot |\alpha_z|)^{1/2}}. \quad (3.20)$$

В окрестности минимума частоты энергии добавка $\Delta D^{\text{III}}_{\text{min}}(\omega)$ отлична от нуля при $\omega > \omega_0$ и равна нулю при $\omega < \omega_0$. Напротив, добавка $\Delta D^{\text{III}}_{\text{max}}(\omega)$ в окрестности максимума частоты отлична от нуля при $\omega < \omega_0$ и равна нулю при $\omega > \omega_0$. Частотная зависимость добавок $\Delta D^{\text{III}}_{\text{min}}(\omega)$ и $\Delta D^{\text{III}}_{\text{max}}(\omega)$ показана на рис. 36, а, б.

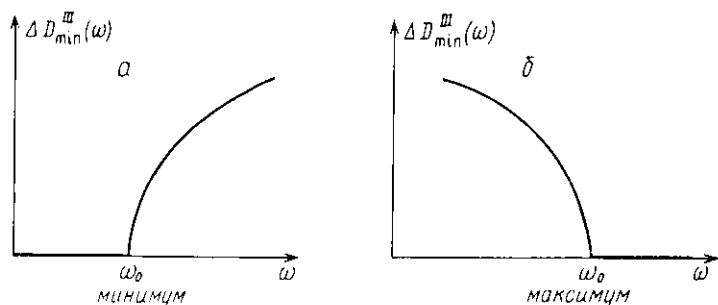


Рис. 36

Добавки $\Delta D^{\text{III}}_{\text{min}}(\omega)$ и $\Delta D^{\text{III}}_{\text{max}}(\omega)$ не нарушают непрерывности общей плотности состояний $D^{\text{III}}(\omega)$ в критических точках, однако приводят к появлению сингулярности производной $\frac{dD^{\text{III}}(\omega)}{d\omega}$, которая в этих точках обращается в бесконечность.

Характер добавок к плотности состояний в окрестности седловых точек можно понять также с помощью разложения (3.16). При двух отрицательных и одном положительном коэффициенте α_i ($i=x, y, z$) уравнение (3.16) описывает поверхность двухполосного гиперboloида (случай, когда при увеличении частоты образуется перемычка между двумя изолированными поверхностями постоянной частоты). При одном отрицательном и двух положительных коэффициентах α_i уравнение (3.16) описывает поверхность однополосного гиперboloида (случай, когда перемычка разрывается). Разложение (3.16) до второго порядка по компонентам $(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)$ недостаточно для замыкания поверхностей постоянной частоты в окрестности седловых точек. Учет членов четвертого порядка позволяет получить следующие выражения для добавок $\Delta D^{\text{III}}(\omega)$:

для случая образования перемычки

$$\Delta D^{\text{III}}(\omega) = \begin{cases} A + B(\omega - \omega_0) & \text{при } \omega > \omega_0; \\ A - \frac{V(\omega_0 - \omega)^{1/2}}{4\pi^2(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y| \cdot |\alpha_z|)^{1/2}} + B(\omega_0 - \omega) & \text{при } \omega < \omega_0; \end{cases} \quad (3.21)$$

для случая образования перемычки

$$\Delta D^{\text{III}}(\omega) = \begin{cases} A + B(\omega - \omega_0) & \text{при } \omega < \omega_0; \\ A - \frac{V(\omega - \omega_0)^{1/2}}{4\pi^2(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y| \cdot |\alpha_z|)^{1/2}} + B(\omega - \omega_0) & \text{при } \omega > \omega_0. \end{cases} \quad (3.22)$$

Здесь A и B — постоянные величины, которые однозначно определяются видом зависимости $\omega = \omega(\mathbf{k})$ в окрестности седловой точки.

Характер добавок к плотности состояний (3.21) и (3.22) иллюстрирует рис. 37. Поясним на качественном уровне возникновение добавок к $D(\omega)$ в виде (3.21) и (3.22). Наличие седловой точки в фоновом спектре означает, что в одном из направ-

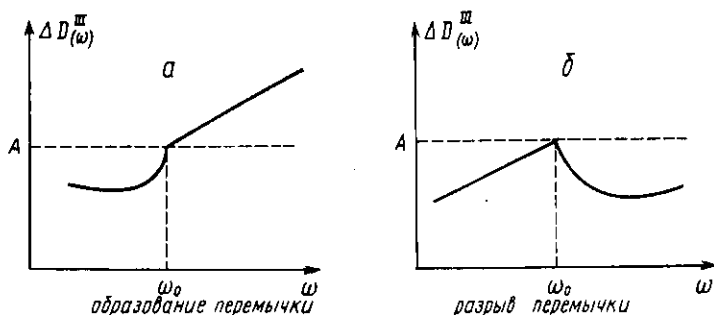


Рис. 37

лений в зоне Бриллюэна закон дисперсии имеет два локальных минимума в близких точках k_0' и k_0'' (рис. 38, а). В малых окрестностях этих точек поверхности постоянной частоты представляют в первом приближении изолированные эллипсоиды. При увеличении частоты ($\omega > \omega_{\min}$) на $\delta\omega$ объемы, ограниченные этими

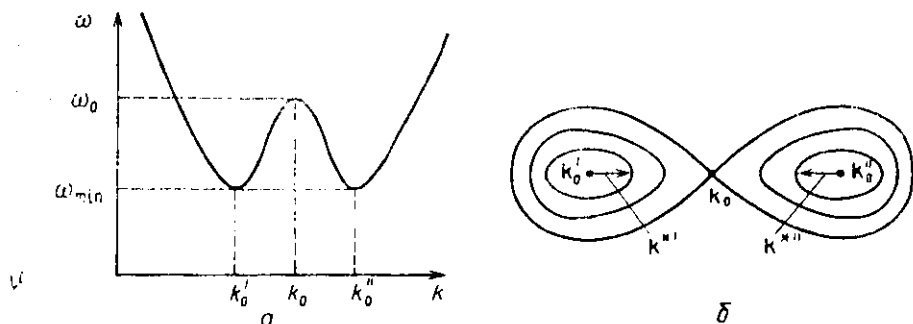


Рис. 38

поверхностями, увеличиваются и расстояния между ними и седловой точкой уменьшаются. Поскольку в седловой точке $\frac{\partial\omega}{\partial k}=0$, увеличение частоты на $\delta\omega$ приводит к тому, что вектора $k^{*'} и k^{*''}$, определяющие расстояние от центров эллипсоидов до их поверхности, должны увеличиваться больше в направлении к седловой точке, нежели в противоположном направлении (рис. 38, б). При этом число состояний dN в слое, заключенном между поверхностями ω и $\omega + \delta\omega$, будет более резко возрастать по сравнению с тем, когда поверхности увеличивались бы, оставаясь подобными самим себе. В результате этого к монотонной составляющей функции $D^{(1)}$ от ω появляется дополнительная добавка $\Delta D^{(1)}(\omega)$, быстро увеличивающаяся при $\omega \rightarrow \omega_0$. В точке $\omega = \omega_0$ две поверхности соединяются в одну, а при $\omega > \omega_0$ возникает гантелеобразная поверхность.

При разрыве перемычки процесс идет в обратном направлении: плотность состояний быстро уменьшается, так как по мере удаления от седловой точки $\omega = \omega_0$ возникшие две изолированные поверхности резко удаляются друг от друга. Как в этом, так и в другом случае на монотонной зависимости $D^{(1)}$ от ω появляются острые изломы, обращенные углом вверх (рис. 37).

Рассмотрим теперь двумерную решетку. При переходе от 3-мерной к 2-мерной системе поверхности постоянной частоты вырождаются в линии на плоскости. Вблизи точек локальных экстремумов линии постоянной частоты представляют собой эллипсы, площади которых равны

$$S_\omega = \pi ab = \pi \frac{|\omega - \omega_0|}{(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y|)^{1/2}}. \quad (3.23)$$

В этом случае добавка к плотности состояний составляет

$$\Delta D^{III}(\omega) = \frac{dN}{d\omega} = \frac{\pi}{(|\alpha_x| \cdot |\alpha_y|)^{1/2}} \quad (3.24)$$

и не зависит от частоты.

Таким образом, при появлении нового эллипса в точке минимума $\omega = \omega_0$ плотность состояний скачком увеличивается на величину (3.24), которая остается постоянной при $\omega > \omega_0$. При исчезновении эллипса в точке максимума $\omega = \omega_0$ плотность состояний скачком уменьшается на величину (3.24). Описанное поведение добавок $\Delta D^{III}(\omega)$ в точках экстремумов иллюстрируют рис. 39 а, б. Особенности, возникающие в седловой точке у двумерной системы, имеют аналогичный характер скачков плотности состояний.

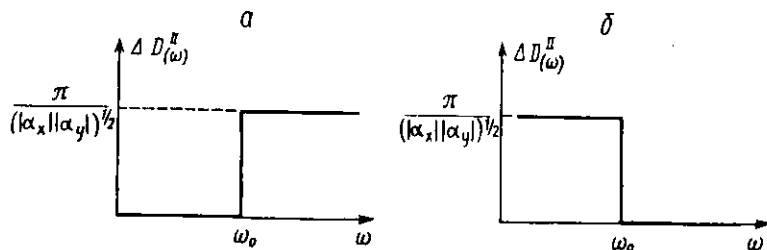


Рис. 39

Перейдем к одномерной системе. Вблизи точки экстремума частоты при $k = k_0$ (см. рис. 21)

$$\omega(k) = \omega_0(k_0) + \alpha(k - k_0)^2 + \dots$$

В окрестности точки k_0 скорость звука становится линейной функцией $(k - k_0)$:

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = 2\alpha(k - k_0),$$

вследствие чего плотность состояний $D^I(\omega)$ (см. (3.10)) быстро возрастает при $k \rightarrow k_0$ и обращается в бесконечность при $k = k_0$:

$$D^I(\omega) = \frac{L}{4\pi |\alpha| \cdot |k - k_0|} = \frac{L}{4\pi |\alpha|^{1/2} \cdot |\omega - \omega_0|^{1/2}}. \quad (3.25)$$

В одномерном случае характер особенностей в плотности состояний в экстремальной точке не зависит от того, имеет ли частота в этой точке локальный максимум или минимум. Седловых точек в одномерном спектре нет.

§ 4. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ОПТИЧЕСКИХ ФОНОНОВ

Рассмотрим функцию спектральной плотности оптических фононов. Как уже указывалось, оптические ветви колебаний возникают в решетках, имеющих более одного атома в элементарной

ячейке или состоящих из атомов разного сорта. В трехмерном кристалле оптические фононы могут иметь как продольную, так и поперечную поляризацию. В двухатомных решетках (решетках с двумя атомами в ячейке) имеются три ветви оптических фононов и две, со взаимно перпендикулярной поляризацией, — для поперечных. Частоты продольных оптических фононов обычно больше, чем поперечных.

Оптические колебания в целом занимают сравнительно узкий интервал частот и, как правило, расположены по частоте выше границы спектра ($\omega^{\text{пред}}$) акустических колебаний или слабо с ним перекрываются. Для оптических колебаний характерны малые значения $\frac{\partial \omega}{\partial k}$ во всем диапазоне частот в каждой ветви спектра

и, как правило, уменьшение $\frac{\partial \omega}{\partial k}$ при $|k| \rightarrow 0$ и $|k| \rightarrow k^{\text{пред}}$ (см.

рис. 17). Функции спектральной плотности оптических фононов $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ представляют собой достаточно узкие кривые с резкими максимумами. Форма пиков зависит от структуры кристаллической решетки и в общем случае может иметь сложный вид. Однако в центре зоны Бриллюэна в окрестности точки $k=0$, где частота оптических колебаний обычно максимальная (хотя это и не обязательно), функции $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ имеют общие черты. Поверхности постоянной частоты в центре зоны всегда замкнуты. Для простоты считаем, что они имеют сферическую форму. Их объем равен $\frac{4}{3} \pi k^3$. Для длинноволновых колебаний (малых k) скорость $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k}$ в центре зоны обычно равна нулю. Поэтому естественно предположить, что зависимость ω от $|k|$ в окрестности центра зоны ($k=0$) имеет вид: $\omega = \alpha k^2$. Тогда объем, ограниченный поверхностью $\omega = \text{const}$, будет равен $\frac{4}{3} \pi \frac{\omega^{3/2}}{\alpha^{3/2}}$. Деля его на

$\frac{(2\pi)^3}{V}$ и дифференцируя по ω , находим

$$D_i^{\text{опт}}(\omega)_{k \rightarrow 0} = \frac{V}{4\pi^3} \frac{(\omega_{\text{max}} - \omega)^{1/2}}{\alpha^{3/2}}. \quad (3.26)$$

Это значит, что функции $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ при значении частоты, соответствующей $k=0$, имеют вертикальную касательную.

На границе зоны, в точке $k=k^{\text{пред}}$, где $\omega_i^{\text{опт}}$ имеет экстремальное значение, скорость $v_g(k)$ может не обращаться в нуль. Считая, что для этого направления k зависимость $\omega^{\text{опт}}$ от $(k^{\text{пред}} - k)$ вблизи границы линейна, $v_g(k)$ можно вынести из-под знака интеграла в (3.7). Для замкнутых поверхностей постоянной частоты $\oint dS \sim |k^{\text{пред}} - k|^2$, в результате чего $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ вблизи экстремальной частоты будет изменяться пропорционально $(\omega_{\text{extr}} - \omega)^2$.

Простейший вид пиков $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ показан на рис. 40 пунктиром; сплошная кривая на этом рисунке изображает суммарную спектральную плотность $D^{\text{опт}}(\omega)$ оптических колебаний. Естественно, что функции $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ согласно (3.6) нормированы:

$$\int_{\omega_{\text{опт}}^{\text{мин}}}^{\omega_{\text{опт}}^{\text{макс}}} D_i^{\text{опт}}(\omega) d\omega = \frac{N}{f_i}. \quad (3.27)$$

У решеток, состоящих из атомов двух сортов, диапазон оптических колебаний $\Delta\omega = \omega_{\text{макс}}^{\text{опт}} - \omega_{\text{мин}}^{\text{опт}}$ становится весьма узким при большой разнице в массе атомов (см. рис. 17).

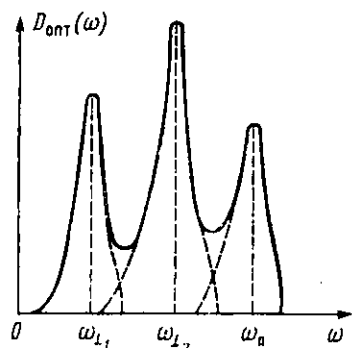


Рис. 40

В этом случае $D_i^{\text{опт}}(\omega)$ представляет собой узкий пик шириной $\Delta\omega$, детали структуры которого не играют существенной роли. Площадь этого пика равна $N/2$, и, следовательно, его высота имеет порядок $\frac{N}{\Delta\omega} \sim \frac{M}{m} \cdot N$. Простейшим приближением для описания спектра оптических колебаний является модель, в которой различные частоты в интервале $\omega_{\text{макс}}^{\text{опт}} > \omega > \omega_{\text{мин}}^{\text{опт}}$ заменяются одной характерной частотой.

§ 5. КВАЗИЛОКАЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ

До сих пор мы рассматривали фононный спектр однородных кристаллов. В действительности в любом кристалле всегда имеются примесные атомы и вакансии. Присутствие посторонних атомов изменяет спектр идеального кристалла. В общем случае возмущение, которое вносит примесный атом, зависит от его массы, величины силовых постоянных, связывающих примесный атом с окружающими атомами кристалла, и положения примесного атома в решетке. Расчет этого возмущения представляет сложную и в известной степени неопределенную задачу, так как для ее решения необходима точная информация о величине и анизотропии силовых постоянных в первой и по крайней мере второй координационных сферах, окружающих примесный атом, а также о его местонахождении в решетке.

Чтобы исключить неопределенность в положении примесных атомов, будем считать, что они замещают собственные атомы кристалла. Для металлов с чисто металлическим характером связи можно предположить, что силовые постоянные должны зави-

сеть от радиуса и анизотропии внутренних электронных оболочек примесного иона и его валентности. Для примесных атомов с большим, чем у атомов кристалла, атомным объемом силовые постоянные должны увеличиваться и наоборот. Однако эти изменения обычно невелики, и для того, чтобы выяснить физическую картину колебаний примесных атомов, учитывать их не будем.

Итак, пусть примесный атом с массой M^* находится в одном из узлов решетки и взаимодействует с окружающими атомами, имеющими массу m , так же как атомы матрицы между собой. Очевидно, в этой модели при равенстве массы примесного атома и атомов матрицы фоновый спектр вообще не изменяется. Если же $M^* \neq m$, то спектр изменяется, причем здесь следует различать два физически различных случая: $M^* < m$ и $M^* > m$.

Рассмотрим случай, когда $M^* < m$.

Для выяснения физической картины решим задачу о колебаниях цепочки атомов с периодом a , в которой один атом замещен на примесный. Посмотрим, чем эта задача отличается от задачи о колебаниях цепочки, состоящей из атомов двух сортов (гл. 2, § 3). Двухатомная цепочка была однородна, и поэтому можно было выбрать любые два разнородных атома и записать для них уравнения движения. Как следствие этого, решение не зависело от номера атома. Теперь ситуация другая. Примесный атом вносит локальное возмущение в колебания цепочки. Поскольку масса M^* примесного атома меньше массы m атомов цепочки, а силовые постоянные везде одни и те же, естественно предположить, что предельная частота колебаний примесного атома $\omega_{\max}^*$ должна превышать предельную частоту колебаний в цепочке, образованной только атомами с массой m , и равную

$$\omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}} \left(k = \pm \frac{\pi}{a} \right).$$

Примесный атом, колеблющийся с частотой $\omega_{\max}^*$, действует с переменной силой на соседние атомы, заставляя их колебаться с такой же частотой. Колебания соседних атомов с частотой $\omega_{\max}^*$ можно рассматривать как вынужденные колебания под действием внешней силы с частотой, большей собственной резонансной частоты атомов цепочки. Поэтому амплитуда колебаний атомов цепочки с частотой $\omega_{\max}^*$ должна быстро уменьшаться при удалении от примесного атома. Колебания с частотой $\omega_{\max}^*$ накладываются на энергетический спектр колебаний невозмущенной, однородной цепочки. Рассмотрим колебания, возбуждаемые с частотой $\omega_{\max}^*$.

Обозначим координату примесного атома $\xi_n = \xi_0$, силовую постоянную, как и раньше, через β и будем для простоты учитывать взаимодействие только с ближайшими соседями.

По аналогии с (2.14) запишем уравнения движения для примесного атома:

$$M^* \ddot{\xi}_0 = \beta (\xi_1 + \xi_{-1} - 2\xi_0), \quad (3.28)$$

для соседнего атома:

$$m \ddot{\xi}_1 = \beta (\xi_2 + \xi_0 - 2\xi_1), \quad (3.29)$$

для следующего за соседним атома:

$$m \ddot{\xi}_2 = \beta (\xi_3 + \xi_1 - 2\xi_2). \quad (3.30)$$

Будем искать решение в форме экспоненциально затухающей при удалении от примесного атома ($n=0$) функции:

$$\xi_n = \xi (-1)^n e^{i \omega_{\max}^* t} e^{-\alpha |n| a}, \quad (3.31)$$

которая при $M^* \rightarrow m$ совпадает с решением

$$\xi_n = \zeta e^{i(\omega t + nka)}$$

уравнения (2.14) для одноатомной цепочки при $k = \frac{\pi}{a}$. При $k = \frac{\pi}{a}$

$$\xi_n = \zeta e^{i \omega_{\max} t} \cos n\pi = \zeta (-1)^n e^{i \omega_{\max} t},$$

очевидно, что при $M^* \rightarrow m$ $\omega_{\max}^* \rightarrow \omega_{\max} = 2 \sqrt{\frac{\beta}{m}}$.

Локальные колебания характеризуют два параметра: $\omega_{\max}^*$ и α , которые и подлежат определению.

Подставляя (3.31) в (3.28), находим

$$(\omega_{\max}^*)^2 = 2 \frac{\beta}{M^*} (1 + e^{-\alpha a}). \quad (3.32)$$

Подстановка (3.31) в уравнения (3.29), (3.30) и последующие дают один и тот же результат:

$$(\omega_{\max}^*)^2 = \frac{\beta}{m} (2 + e^{-\alpha a} + e^{+\alpha a}). \quad (3.33)$$

Уравнения (3.32) и (3.33) совместимы при

$$e^{\alpha a} = \frac{2m - M^*}{M^*}, \quad (3.34)$$

откуда имеем

$$(\omega_{\max}^*)^2 = \frac{4\beta}{m} \cdot \frac{m^2}{2mM^* - (M^*)^2}. \quad (3.35)$$

Легко заметить, что при $M^* = m$ $(\omega_{\max}^*)^2 = \omega_{\max}^2 = 4 \frac{\beta}{m}$. При $M^* \ll m$

$$(\omega_{\max}^*)^2 \simeq \omega_{\max}^2 \frac{m}{2M^*} = 2 \frac{\beta}{M^*}.$$

Но это соотношение означает, что примесный атом в цепочке колеблется так, как если бы соседние с ним атомы были неподвиж-

ны, т. е. частота колебаний примесного атома равна частоте парциальных колебаний $\left(\sqrt{\frac{2\beta}{M^*}}\right)$ атома с массой M^* в цепочке с силовой постоянной β .

Посмотрим, как при уменьшении массы примесного атома изменяется область, в которой локализуются колебания с частотой $\omega_{\max}^*$. Ширина этой области определяется множителем $e^{-\alpha/|n|a}$. Амплитуды высокочастотных колебаний убывают при удалении от примесного атома (при росте n) по закону:

$$\xi(e^{\alpha a})^{-|n|} = \xi \left(\frac{2m - M^*}{M^*} \right)^{-|n|}. \quad (3.36)$$

При $M^*=0,5$ амплитуда соседнего атома в три раза меньше амплитуды ξ , следующего — в 9 раз; при $M^*=0,2m$ амплитуда соседа в 10 раз меньше амплитуды примесного атома, следующего — в 100 раз и т. д. Обратим внимание, что при $M^*=m$ амплитуда ξ перестает зависеть от n . Таким образом, легкий примесный атом в решетке колеблется с частотой, превышающей предельную частоту акустических колебаний (а в кристаллах с несколькими атомами в элементарной ячейке — оптических).

Высокочастотные колебания локализуются в очень малом объеме кристалла. Их амплитуда быстро затухает при удалении от легкого атома. Поскольку в решетке не существует коллективных возбуждений (акустических и оптических) такой частоты, примесный атом колеблется практически индивидуально, слабо возмущая, с одной стороны, колебания соседних атомов в решетке, а с другой — слабо изменяя частоту собственных (парциальных) колебаний в результате связи с ними. При этом разность фаз между колебаниями примесного атома и соседней непрерывно меняется. Колебания примесного атома квантуются:

$$e_l^{\text{примесн}} = \hbar \omega_{\max}^* (l + 1/2), \quad (3.37)$$

где $l=0, 1, 2, \dots$, что позволяет говорить о локальных фононах с энергией $\hbar \omega_{\max}^*$. Колебаниям легких примесных атомов в решетке соответствует в спектре плотности фононных состояний очень узкий по частоте пик, расположенный правее предельной фононной частоты. Заметим, что примесный высокочастотный пик в плотности фононных состояний может возникнуть даже в том случае, если масса примесных атомов близка к массе атомов матрицы, но силовые постоянные, связывающие примесный атом с соседними, по какой-либо причине сильно увеличены.

Качественно отличная ситуация имеет место при рассмотрении колебаний тяжелых примесных атомов, масса которых $M^* > m$. Дело заключается в том, что парциальная частота колебаний ω^* тяжелого атома лежит в области разрешенных фононных частот. Поэтому взаимодействие примесных колебаний с колебаниями решетки в общем случае является достаточно сложным. Задача несколько упрощается для очень тяжелых примесей, когда $M^* \gg$

»*т.* В этом случае примесный атом можно рассматривать как осциллятор с собственной частотой, близкой к ω^* . На этот осциллятор действует спектр возбуждающих сил с частотами, соответствующими области фононных частот от $\omega_{\min}$ до $\omega_{\max}$. Очевидно, из всей области фононных частот примесный атом наиболее эффективно (резонансно) взаимодействует только с модами колебаний, имеющими частоты, близкие к ω^* . Остальные моды оказывают слабое влияние на его колебания. Обратим внимание, что резонансное возбуждение колебаний примесного атома происходит под действием продольных и поперечных мод (в трехмерном случае), имеющих одну и ту же частоту $\sim \omega^*$, но разные длины волн.

Известно, что амплитуда колебаний осциллятора под действием вынуждающей силы при резонансе пропорциональна корню квадратному из его массы. Поэтому амплитуда колебаний примесного тяжелого атома в решетке превышает амплитуду фоно-

нных мод той же частоты приблизительно в $\sqrt{\frac{M^*}{m}}$ раз, что позволяет говорить о квазилокализованных резонансных колебаниях тяжелых атомов в решетке. Подчеркнем, что большая амплитуда колебаний примесного атома соответствует уровню теплового возбуждения колебаний решетки при данной температуре и связана только с большей массой примеси. Сдвиг фаз между колебаниями примесного атома и соседних атомов, колеблющихся с частотой ω^* , должен быть близок (как при резонансе под действием возбуждающей силы) к $\frac{\pi}{4}$. Усиление амплитуды акустиче-

ских колебаний в некотором интервале частот вблизи ω^* приводит к появлению на кривой спектральной плотности фононных состояний размытого максимума, накладывающегося на монотонную зависимость D от ω в области низких частот (поэтому такие колебания принято называть квазилокальными в отличие от чисто локальных колебаний при $M^* \ll m$). Отметим еще одну общую черту квазилокальных колебаний. Различие в амплитуде и фазе колебаний примесных атомов и окружающих их атомов решетки, а также изменение силовых постоянных, связывающих примесный атом с соседями, приводят к нарушению симметрии сил взаимодействия соседних атомов в направлении к примесному атому и в противоположном. Нарушение симметрии может приводить к возникновению сильного ангармонизма колебаний окружающих примесный атом в радиальном направлении, который быстро затухает при удалении от центра. Таким образом, вокруг каждого примесного тяжелого атома в решетке образуется область с усиленным ангармонизмом колебаний атомов, охватывающим 2—3 координационные сферы.

§ 6. ТЕМПЕРАТУРА ДЕБАЯ

Температуру Дебая как параметр, связывающий предельную частоту колебаний с соответствующей тепловой энергией классического осциллятора, можно ввести однозначно только для одномерной цепочки атомов:

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega^{\text{пред}}}{k},$$

так как только в этом случае имеется одна предельная частота. Но уже и здесь нужно знать закон дисперсии $\omega(k)$, чтобы выразить $\omega^{\text{пред}}$ через силовые постоянные или другие параметры, например через скорость звука.

У реальных кристаллов ситуация усложняется тем, что, во-первых, имеются три различные ветви спектра с различными значениями $\omega^{\text{пред}}$ и, во-вторых, для каждой ветви спектра нет одного предельного значения частоты: $\omega^{\text{пред}}$ расположены в интервале

$$\omega_{\min_i}^{\text{пред}} < \omega^{\text{пред}} < \omega_{\max_i}^{\text{пред}} \quad (\text{см. рис. 34, а}).$$

В связи с этим температура Дебая для кристаллов может быть введена лишь как некоторый усредненный параметр, величина которого зависит от способа определения. Усреднение для каждой ветви спектра позволяет ввести температуру Дебая отдельно для продольных и поперечных ветвей спектра:

$$\bar{\theta}_{D\parallel} = \frac{\hbar \bar{\omega}_{\parallel}^{\text{пред}}}{k}; \quad \bar{\theta}_{D\perp_1} = \frac{\hbar \bar{\omega}_{\perp_1}^{\text{пред}}}{k}; \quad \bar{\theta}_{D\perp_2} = \frac{\hbar \bar{\omega}_{\perp_2}^{\text{пред}}}{k}, \quad (3.38)$$

где $\bar{\omega}_{\parallel}^{\text{пред}}$, $\bar{\omega}_{\perp_1}^{\text{пред}}$, $\bar{\omega}_{\perp_2}^{\text{пред}}$ — некоторые усредненные (по определенной процедуре) значения предельных частот в интервале $\omega_{\min_i}^{\text{пред}} < \omega < \omega_{\max_i}^{\text{пред}}$. Естественно, что процедура усреднения требует определенных предположений о законе дисперсии $\omega_i = \omega_i(k)$.

Дебай предложил аппроксимировать каждую функцию $D_i(\omega)$ зависимостями (3.11) и определять значения $\bar{\omega}_i^{\text{пред}}$ из условий нормировки (3.12), считая, что $v_{\text{зв}_i}$ постоянно для каждой ветви спектра.

Для реальных кристаллов (даже для простой кубической решетки) ситуация усложняется тем, что скорости $v_{\text{зв}\parallel}$ и $v_{\text{зв}\perp}$ звуковых волн являются функциями направления волнового вектора. Поэтому в каждой решетке существуют определенные диапазоны скоростей для волн разного типа, в связи с чем понятие «средняя» скорость звука $\bar{v}_{\text{зв}}$ является весьма неопределенным. Ее можно ввести, например, при малых $|k|$ (где закон дисперсии линеен), аппроксимируя поверхности постоянной частоты (см. рис. 24, 26) для каждого типа волн сферами с некоторыми средними радиусами $|k(\omega)|^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ и определяя $\bar{v}_{\text{зв}_i}$ по формуле

$$\bar{v}_{zv_i} = \frac{\omega}{k_i(\omega)}. \quad (3.39)$$

Считая теперь, что $\bar{v}_{zv_i} = \text{const}$, по формуле (3.12) находим

$$\bar{\omega}_i^{\text{пред}} = \bar{v}_{zv_i} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \quad (3.40)$$

и по формулам (3.38) вычисляем $\bar{\theta}_{Di}$.

Некоторую единую среднюю температуру $\bar{\theta}_D$ для кристалла можно ввести, аппроксимируя функцию $D(\omega)$ для общей плотности состояний параболической зависимостью (3.11), резко обрывающейся при частоте $\bar{\omega}^{\text{пред}}$ (см. рис. 33, пунктир).

$\bar{\omega}^{\text{пред}}$ находится из условия

$$\int_0^{\bar{\omega}^{\text{пред}}} D(\omega) d\omega = 3N,$$

где

$$D(\omega) = \sum_{i=1}^3 D_i(\omega) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \left(\frac{1}{\bar{v}_{zv\parallel}^3} + \frac{1}{\bar{v}_{zv\perp_1}^3} + \frac{1}{\bar{v}_{zv\perp_2}^3} \right) = \frac{V\omega^2}{2\pi^2} \frac{3}{\bar{v}_{zv}^3}. \quad (3.41)$$

Отсюда

$$\bar{\omega}^{\text{пред}} = \bar{v}_{zv} \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3},$$

где

$$\frac{3}{\bar{v}_{zv}^3} = \frac{1}{\bar{v}_{zv\parallel}^3} + \frac{1}{\bar{v}_{zv\perp_1}^3} + \frac{1}{\bar{v}_{zv\perp_2}^3} \quad \text{и} \quad \bar{\theta}_D = \frac{\hbar \bar{\omega}^{\text{пред}}}{k}. \quad (3.42)$$

Из сказанного следует, что введенная таким образом температура $\bar{\theta}_D$ является условным параметром, величина которого определяется рассмотренной процедурой и зависит от принятой модели. Естественно, что и любая другая схема определения одного значения температуры Дебая для реального кристалла будет столь же условной, так как предельные значения частоты колебаний для различных направлений k и ветвей спектра всегда занимают достаточно широкий интервал частот. Поэтому физический смысл температуры Дебая как параметра, характеризующего энергетическое состояние кристалла, заключается в том, что $\bar{\theta}_D$ условно разделяет шкалу температур на две области: при $T \ll \bar{\theta}_D$ в кристалле существуют лишь длинноволновые колебания с энергией, малой по сравнению с $k\bar{\theta}_D$; при $T > \bar{\theta}_D$ в кристалле возбуждены все колебания, включая колебания с предельно возможной частотой, энергия которых порядка $k\bar{\theta}_D$.

§ 1. ЭНЕРГИЯ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ РЕШЕТКИ

Тепловая энергия $\bar{u}$ решетки при температуре T является суммой средних тепловых энергий $\bar{u}_i = \frac{\hbar\omega_i}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i}{kT}\right) - 1}$ (см. (2.6)) отдельных мод колебаний во всех $3j$ ветвях спектра:

$$\bar{u} = \sum_{i=1}^{3j} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_i(\mathbf{k})}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_i(\mathbf{k})}{kT}\right) - 1}. \quad (4.1)$$

Сумма $\sum_{\mathbf{k}}$ обозначает суммирование по всем разрешенным состояниям волнового вектора в зоне Бриллюэна в i -й ветви спектра.

Чтобы провести суммирование в (4.1), необходимо располагать аналитическими выражениями для закона дисперсии в каждой ветви спектра. Поэтому удобнее выразить энергию $\bar{u}$ через функцию плотности состояний фононов, которая характеризует закон дисперсии в целом. Как указывалось, функция $D(\omega)$ определяет плотность распределения различных мод колебаний по частоте. Величина $D(\omega)d\omega$ выражает число состояний с частотой ω , расположенных в интервале $d\omega$.

Энергия колебаний $\bar{u}(\omega)$ каждой моды с частотой ω равна $\frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}$, так что энергия колебаний всех мод в интервале $\omega \div \omega + d\omega$ равна $\bar{u}(\omega)D(\omega)d\omega$, а общая энергия всех колебаний

$$\bar{u} = \int_0^{\infty} \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} D(\omega) d\omega. \quad (4.2)$$

Формула (4.2) идентична формуле (4.1), которую нетрудно преобразовать к этому виду, вводя функцию $D(\omega)$.

К сожалению, даже для простых трехмерных структур функцию спектральной плотности фононов очень трудно получить в аналитическом виде. Поэтому вычисление энергии колебаний решетки по формуле (4.2) может быть проведено лишь для конкретных моделей, в которых делаются определенные предложения о характере функции $D(\omega)$; т. е. реальный вид плотности состояний аппроксимируется более простыми зависимостями D от

ω . Обычно рассматриваются две наиболее простые модели: Дебая и Эйнштейна.

Однако характер зависимости энергии $\bar{u}$ от температуры при $T < \bar{\theta}_D$ и $T > \bar{\theta}_D$ можно получить без особых предположений. При $T < \bar{\theta}_D$ оптические фононы не возбуждаются (их энергия порядка $k\bar{\theta}_D$) и основной вклад в энергию дают только низкочастотные акустические колебания, для которых поверхности постоянной частоты замкнуты и в области малых $|k|$ (в области линейности закона дисперсии изменяются с частотой, оставаясь подобными самим себе). Поэтому можно считать, что объем, ограниченный поверхностями постоянной частоты $\omega_i = \omega_i(k)$, в этой области k изменяется пропорционально $|k|^3$. В области линейности закона дисперсии ($\omega_i \sim |k|$) при температуре T возбуждаются в основном колебания с частотами $\omega_i \leq \frac{kT}{\hbar}$ (см. § 1 гл. 2), которым соответствуют значения волновых векторов k , расположенные внутри поверхности $\omega_i(k) = \frac{kT}{\hbar}$. Объем этой поверхности изменяется пропорционально ω^3 и, следовательно, T^3 . Плотность состояний волновых векторов в зоне Бриллюэна постоянна, вследствие чего число возбужденных состояний при температуре T изменяется также пропорционально T^3 .

Средняя энергия возбуждения каждой моды колебаний с частотой $\omega < \frac{kT}{\hbar}$ равна kT .

Общая тепловая энергия возбужденных колебаний

$$\bar{u} \sim kT \cdot T^3 \sim T^4.$$

В двумерных (плоских) решетках число возбужденных состояний изменяется пропорционально T^2 и тепловая энергия

$$\bar{u} \sim T^3.$$

Аналогично для одномерных цепочек имеем

$$\bar{u} \sim T^2.$$

При $T > \bar{\theta}_D$ число мод акустических колебаний не зависит от температуры и равно полному числу $3N$ состояний в зоне Бриллюэна. При изменении температуры изменяется пропорционально T только энергия каждой моды колебаний. Общая энергия акустических колебаний в этом случае имеет порядок

$$\bar{u} \sim 3NkT.$$

Если в спектре присутствуют оптические моды колебаний, то при температурах порядка $\bar{\theta}_D$ они могут давать заметный вклад в энергию тепловых колебаний решетки. Однако частоты оптических колебаний, как указывалось, обычно выше предельной частоты $\omega^{\text{пред}}$ в спектре акустических колебаний и, следовательно,

превышают $\frac{k\bar{\theta}_D}{h}$. Поэтому число возбужденных мод с частотой $\omega_i^{\text{опт}}$ оптических колебаний при $T \sim \bar{\theta}_D$ экспоненциально зависит от температуры (см. (2.5)). Средняя энергия каждой моды $\bar{u}_i^{\text{опт}}$ выражается формулой (2.6). Средняя энергия возбужденных мод оптических колебаний в i -й ветви спектра экспоненциально зависит от температуры.

§ 2. ТЕОРИЯ ТЕПЛОЕМКОСТИ ДЕБАЯ

Модель Дебая позволяет рассчитывать энергию тепловых колебаний $\bar{u}$ и теплоемкость c решетки в предположении, что функция плотности состояний имеет вид, изображенный на рис. 33 пунктирной линией, т. е. описывается формулой (3.11). Подставим $D(\omega)$ (3.11) в формулу (4.2), тогда получим

$$\bar{u}_D^{\text{III}} = \frac{\hbar V}{\pi^2 v_{\text{зв}}^3} \int_0^{\bar{\omega}^{\text{пред}}} \frac{\omega^3 d\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

Заменим $\frac{\hbar\omega}{kT}$ на x :

$$\bar{u}_D^{\text{III}} = \frac{3Vk^4T^4}{2\pi^2\hbar^3v_{\text{зв}}^3} \int_0^{x_m} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}, \quad (4.3)$$

где $x_m = \frac{\hbar\bar{\omega}^{\text{пред}}}{kT}$ и $\bar{\omega}^{\text{пред}}$ определяется (3.40).

Выражение (4.3) носит название интерполяционной формулы Дебая и дает возможность в рамках модели Дебая рассчитать $\bar{u}_D^{\text{III}}$ при различных температурах T . Формулу (4.3) можно преобразовать, введя усредненную температуру $\bar{\theta}_D = \frac{\hbar\bar{\omega}^{\text{пред}}}{k}$ и используя выражение (3.40) для $\bar{\omega}^{\text{пред}}$, к следующему виду:

$$\bar{u}_D^{\text{III}} = 9kNT \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^3 \int_0^{\bar{\theta}_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (4.4)$$

При $T \ll \bar{\theta}_D$ верхний предел интеграла можно положить равным бесконечности, так что

$$\bar{u}_D^{\text{III}} = 9kNT \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}. \quad (4.5)$$

Интеграл $\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = 6\zeta(4) = \frac{\pi^4}{15}$, где $\zeta(z)$ — дзета-функция Римана.

Таким образом, при $T \ll \bar{\theta}_D$

$$\bar{u}_D^{\text{III}}(T) = \frac{3}{5} \pi^4 k N \frac{T^4}{\bar{\theta}_D^3}, \quad (4.6)$$

откуда

$$c_D^{\text{III}} = \frac{\partial \bar{u}_D^{\text{III}}}{\partial T} = \frac{12\pi^4 k N}{5} \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^3 = 234 k N \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^3. \quad (4.7)$$

Выражение (4.7) носит название закона Дебая и численно хорошо согласуется с экспериментальными данными для решеточной теплоемкости у большинства твердых тел при температурах $T < 0,1\bar{\theta}_D$.

Численный коэффициент в законе Дебая естественно зависит от способа введения температуры Дебая $\bar{\theta}_D$.

В области высоких температур $T > \bar{\theta}_D$ переменная x интегрирования в (4.3) меньше единицы во всем интервале от 0 до x_m . В этом случае экспоненту под интегралом можно разложить в ряд $e^x = 1 + x + x^2 \dots$ и ограничиться первыми двумя членами. При $T > \bar{\theta}_D$ получаем

$$\bar{u}_D^{\text{III}} = 3kNT, \quad (4.8)$$

$$c_D^{\text{III}} = 3kN. \quad (4.9)$$

Постоянное значение теплоемкости решетки при высоких температурах соответствует известному закону Дюлонга и Пти для величины c_v , справедливому для большинства простых тел. Дифференцируя (4.3) по T , можно получить так называемую интерполяционную формулу для теплоемкости во всем интервале температур:

$$c_D^{\text{III}} = \frac{\partial \bar{u}_D^{\text{III}}}{\partial T} = 9kN \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^3 \int_0^{\bar{\theta}_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{e^x - 1}. \quad (4.10)$$

Эта формула удовлетворительно описывает зависимость теплоемкости от температуры у многих металлов (в частности, у Al и Cu) во всей области температур до температуры плавления.

Аналогичным способом можно получить интерполяционную формулу Дебая и для двухмерной решетки:

$$\bar{u}_D^{\text{II}} = 4kNT \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^2 \int_0^{\bar{\theta}_D/T} \frac{x^3 dx}{e^x - 1},$$

где

$$\bar{\theta}_D = \frac{\hbar \omega^{\text{пред}}}{k} = \frac{\hbar}{k} \bar{v}_{\text{за}} \sqrt{4\pi \frac{N}{S}}. \quad (4.11)$$

При высоких температурах $T > \bar{\theta}_D$ (4.11) переходит в $\bar{u}_D^{\text{II}} = 2kNT$, откуда следует аналог закона Дюлонга и Пти для двухмерной решетки:

$$c_D^{\text{II}} = 2kN.$$

При низких температурах $T \ll \bar{\theta}_D$ (4.11) переходит в

$$\bar{u}_D^{\text{II}} = 8\zeta(3) kNT \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^2 \simeq 9,6 kNT \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^2, \quad (4.12)$$

откуда

$$c_D^{\text{II}} = 24\zeta(3) kN \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^2 \simeq 28,8 kN \left(\frac{T}{\bar{\theta}_D} \right)^2. \quad (4.13)$$

При использовании формулы Дебая необходимо иметь в виду, что сделанные при ее выводе предположения весьма далеки от реальности. Поэтому нельзя ожидать, что интерполяционная формула будет хорошо согласовываться с экспериментальными данными в широком интервале температур. Даже наоборот — хорошее согласие ее в некоторых случаях с экспериментом является удивительным. Однако если в формулу (4.2) вместо дебаевской плотности состояний подставить истинный вид функции $D(\omega)$ для данного вещества, то вычисленные значения теплоемкости должны весьма точно описывать экспериментальные данные, так как по своей структуре формула (4.2) является точной.

§ 3. МОДЕЛЬ ЭЙНШТЕЙНА

Эйнштейн предложил рассматривать кристалл как совокупность $3N$ независимых квантовых осцилляторов, колеблющихся с некоторой собственной частотой ω_0 . По существу, эта модель совершенно неприменима для описания акустических колебаний решетки. Частотный спектр колебаний решетки квазинепрерывен и при низких температурах вообще не содержит высокочастотных мод колебаний.

Поэтому модель Эйнштейна можно использовать лишь для описания энергии теплового возбуждения оптических фононов в том случае, когда частотный интервал оптических колебаний достаточно узок и его можно аппроксимировать одной частотой $\omega_i^{\text{опт}}$. В этой модели плотность фононных состояний $D_{\text{Э}i}(\omega)$ в i -й ветви спектра оптических колебаний, пропорциональная δ -функции аргумента, $\omega - \omega_i^{\text{опт}}$:

$$D_{\text{Э}i}(\omega) = B \cdot \delta(\omega - \omega_i^{\text{опт}}). \quad (4.14)$$

Коэффициент пропорциональности определяется из условия нормировки (3.6) и равен $N/2$. Для трехмерной решетки, состоящей из атомов двух сортов, имеются три характерные частоты оптических фононов $\omega_{\parallel}^{\text{опт}}$, $\omega_{\perp 1}^{\text{опт}}$ и $\omega_{\perp 2}^{\text{опт}}$, соответствующие ветвям продольных и поперечных колебаний. В этом приближении каждая ветвь спектра оптических колебаний рассматривается как $\frac{N}{2}$ линейных осцилляторов. Колебания в оптических ветвях имеют различные частоты и поляризованы в трех взаимно перпендикулярных направлениях. Каждой группе осцилляторов при этом соответствует своя δ -функция в плотности состояний.

Средняя энергия i -й ветви оптических колебаний со средней частотой $\omega_i^{\text{опт}}$ при температуре T равна

$$\bar{u}_i^{\text{опт}} = \frac{N}{2} \frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{e^{\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT}} - 1}. \quad (4.15)$$

Теплоемкость, связанная с возбуждением колебаний в этой ветви спектра, имеет вид

$$c_i^{\text{опт}} = \frac{\partial \bar{u}_i^{\text{опт}}}{\partial T} = k \frac{N}{2} \left(\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT} \right)^2 \frac{e^{-\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT}}}{\left(e^{-\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT}} - 1 \right)^2}. \quad (4.16)$$

При низких температурах, когда

$$kT \ll \hbar \omega_i^{\text{опт}},$$

$$\bar{u}_i^{\text{опт}} = \frac{N}{2} \hbar \omega_i^{\text{опт}} e^{-\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT}}, \quad (4.17)$$

$$c_i^{\text{опт}} = k \frac{N}{2} \left(\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT} \right) e^{-\frac{\hbar \omega_i^{\text{опт}}}{kT}}. \quad (4.18)$$

Оптические моды в этой области температур дают экспоненциально возрастающую с температурой добавку к теплоемкости, обусловленной акустическими колебаниями. При высоких температурах $kT > \hbar \omega_i^{\text{опт}}$

$$\bar{u}_i^{\text{опт}} = \frac{N}{2} kT, \quad (4.19)$$

$$c_i^{\text{опт}} = k \frac{N}{2}.$$

При высоких температурах, когда возбуждены все моды оптических колебаний, они дают постоянный, не зависящий от температуры вклад в теплоемкость.

Заметим, что для решетки с двумя атомами в элементарной ячейке число колебательных мод в одной ветви спектра равно не N , а $\frac{N}{2}$ (т. е. числу элементарных ячеек). Поэтому акустические колебания при высоких температурах дают точно такой же вклад в теплоемкость, как и оптические колебания, равный $\frac{3}{2}kN$.

Глава 5

АНГАРМОНИЗМ КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ В РЕШЕТКЕ

§ 1. ПРИРОДА АНГАРМОНИЗМА

До сих пор колебания решетки рассматривались в гармоническом приближении, т. е. предполагалось, что потенциальная энергия U взаимодействия атомов в кристалле (рис. 1) является квадратичной функцией смещения атомов из положения равновесия. Характерной особенностью колебания атомов в параболической потенциальной яме $U(\xi) = \frac{\beta \xi^2}{2}$ является сохранение симметрии колебаний относительно положения равновесия при увеличении амплитуды колебаний (т. е. при переходе осциллятора на более высокие энергетические уровни). Поэтому возбуждение осциллятора в гармоническом приближении не приводит к изменению среднего по времени положения атома относительно точки равновесия $r=r_0$, что означает отсутствие теплового расширения тела (рис. 41). Соответственно силы $f(\xi) = -\frac{\partial U(\xi)}{\partial \xi} = -\beta \xi$, возникающие при смещении атома из положения равновесия, имеют

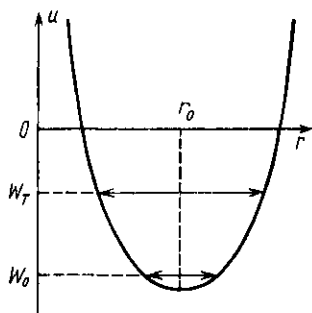


Рис. 41

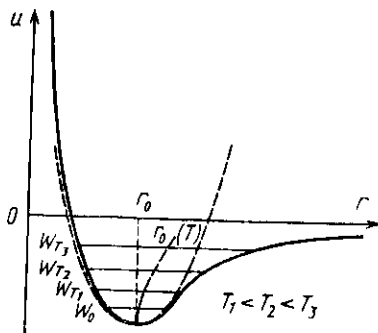


Рис. 42

одну и ту же величину независимо от того, смещается ли атом в направлении к ближайшему соседу (т. е. расстояние между атомами уменьшается) или удаляется от него. В результате силовые постоянные не зависят от объема кристалла (внешнего давления) и температуры. Постоянство частоты колебаний каждой моды при изменении температуры является основной причиной постоянного значения теплоемкости при $T > \theta_D$. Кроме того, монохроматические волны не взаимодействуют между собой и, следовательно, монохроматические фононы не рассеиваются друг на друге.

В действительности колебания решетки не являются гармоническими. Физическая причина ангармонизма заключается в асимметрии сил, действующих на атом при его смещении. Рассмотрим какой-либо атом в одномерной цепочке. Сместим атом из положения равновесия в направлении к соседу слева. При этом расстояние между выбранным атомом и соседом слева уменьшится, а расстояние до соседа справа увеличится. В результате нелинейности сил взаимодействия на смещенный атом со стороны левого соседа действует большая сила, чем со стороны соседа справа, хотя обе силы стремятся вернуть атом в положение равновесия. То же происходит и при тепловых колебаниях атомов, при которых расстояния между атомами в решетке изменяются нерегулярным образом: в любой момент времени каждый атом оказывается ближе к какому-либо одному из своих соседей, чем к другим, и возникающие силы отталкивания всегда превышают силы притяжения. Такая асимметрия сил взаимодействия означает, что в выражение для U входят члены, содержащие ξ в степени более высокой, чем вторая.

Зависимость потенциальной энергии от расстояния при этом показана на рис. 42. Энергия U возрастает при сближении атомов быстрее, чем по параболическому закону (пунктир), а при их удалении друг от друга — медленнее. Такой характер отклонения $U(\xi)$ от параболы описывается поправкой, пропорциональной ξ^3 :

$$U(\xi) = \frac{\beta \xi^2}{2} - \frac{g \xi^3}{3}, \text{ где } g > 0. \quad (5.1)$$

В результате нелинейности сил взаимодействия по ξ силовые постоянные в решетке и частоты колебания атомов зависят от их амплитуды, а следовательно, и от температуры. Ангармонизм колебаний определяет тепловое расширение тела, зависимость упругих постоянных от давления и температуры, небольшое возрастание теплоемкости при $T > \theta_D$ и фонон-фононное взаимодействие.

§ 2. ТЕПЛОВОЕ РАСШИРЕНИЕ ТЕЛ

Тепловое расширение тел является следствием асимметрии функции $U(r)$, величина которой описывается коэффициентом g в (5.1). Связь между асимметрией потенциальной ямы и тепловым

расширением можно пояснить на примере одного осциллятора, колеблющегося в потенциальной яме (рис. 42). При увеличении амплитуды колебаний осциллятор переходит на все более высокие уровни энергии $U=W_T$. На каждом возбужденном уровне расстояние между ветвями параболы определяет удвоенную амплитуду колебаний. Поскольку яма асимметрична, при таких переходах среднее по времени значение координаты атома увеличивается. Чем больше асимметрия потенциальной ямы (больше g), тем больше коэффициент теплового расширения.

В твердом теле потенциальная энергия кристалла является асимметричной функцией среднего расстояния a между атомами, причем $U(a_1) > U(a_2)$ при $a_1 < a_0$, $a_2 > a_0$, где a_0 — равновесное среднее расстояние между атомами. Значит, для описания теплового расширения тела можно воспользоваться приближенной моделью, в которой решетка заменена совокупностью ангармонических осцилляторов, потенциальная энергия каждого из которых описывается выражением (5.1). В этом случае при повышении температуры не только увеличивается амплитуда колебаний каждого осциллятора, но также происходит увеличение средних расстояний между ними.

Свяжем коэффициент теплового расширения α в известной формуле $l=l_0(1+\alpha T)$, где l и l_0 — линейные размеры тела при температуре T и $T=0$ К соответственно, с коэффициентом ангармоничности g . Изменение среднего положения осциллятора при нагревании характеризуется средним значением его смещения $\bar{\xi}$ из положения равновесия $r=r_0$ при температуре T . В классическом приближении $\bar{\xi}$ можно рассчитывать известным методом определения средних значений параметров осциллятора:

$$\bar{\xi} = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \xi e^{-\frac{U(\xi)}{kT}} d\xi}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{U(\xi)}{kT}} d\xi} \cong \frac{\sqrt{\pi}}{4} \frac{\left(\frac{2kT}{\beta}\right)^{5/2} \frac{g}{kT}}{\left(\frac{2\pi kT}{\beta}\right)^{1/2}} = g \frac{kT}{\beta^2}. \quad (5.2)$$

Относительное удлинение тела при температуре T

$$\frac{l-l_0}{l_0} = \frac{\bar{\xi}}{r_0} = \frac{gkT}{r_0\beta^2} = \alpha T. \quad (5.3)$$

Отсюда

$$\alpha = \frac{k}{r_0\beta^2} g. \quad (5.4)$$

Этот результат можно получить путем следующих простых рассуждений. Средняя за период колебаний сила $\bar{f}$, действующая на осциллятор, должна быть равна нулю:

$$\bar{f} = -\beta \bar{\xi} + g \bar{\xi}^2 = 0. \quad (5.5)$$

Здесь $\bar{\xi}$ и $\bar{\xi}^2$ — средние значения смещения ξ и квадрата этой величины. Отсюда следует, что $\bar{\xi} = \frac{g\bar{\xi}^2}{\beta} > 0$ (при $g=0$, очевидно, и $\bar{\xi}=0$). В классическом приближении средняя потенциальная энергия тепловых колебаний осциллятора $\overline{U(\xi)} \simeq \frac{1}{2} \beta \bar{\xi}^2 = \frac{1}{2} kT$. Используя это выражение, получаем

$$\bar{\xi} = g \frac{kT}{\beta^2}.$$

Квантовомеханический аналог выражения (5.2) можно получить по принципу соответствия, заменяя среднюю энергию $\frac{1}{2} kT$ классического осциллятора с частотой ω_0 на среднюю энергию $\bar{u}$ квантового осциллятора (2.6): $\bar{u} = \frac{\hbar\omega_0}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} - 1}$. Таким образом,

$$\frac{\bar{\xi}}{r_0} = \frac{2g}{\beta^2 r_0} \frac{kT}{2} = \frac{2g}{\beta^2 r_0} \bar{u} = \frac{2g}{\beta^2 r_0} \frac{\hbar\omega_0}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{kT}} - 1} \quad (5.6)$$

при высоких температурах ($kT > \hbar\omega_0$) и выражение (5.6) переходит в (5.3). Однако при низких температурах ($T \ll \frac{\hbar\omega_0}{k}$)

$$\bar{u} \simeq \hbar\omega_0 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{kT}}$$

экспоненциально уменьшается при понижении температуры, в результате чего коэффициент α теплового расширения должен уменьшаться по мере приближения к $T=0$ К. При абсолютном нуле температуры α обращается в нуль. Отсюда следует, что при очень низких температурах размеры твердых тел практически не меняются при небольших вариациях температуры. Это обстоятельство используется, например, при создании высокочастотных резонаторов, обеспечивающих очень высокую стабильность частоты.

Линейный закон изменения размеров тел при нагревании имеет место только в некоторой области средних температур (рис. 43). При низких температурах α стремится к нулю и тепловое расширение практически отсутствует. С другой стороны, при температурах, близких к $T_{пл}$, в зависимости U от ξ становятся существенными высшие ангармонические члены, пропорциональные ξ^5 , ξ^7 и т. д. Учет этих членов приводит к увеличению α и отклонению от линейного закона теплового расширения.

§ 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ФОНОНОВ (ФОНОН-ФОНОННОЕ РАССЕЯНИЕ)

Основной причиной, вызывающей рассеяние фононов на фононах, является ангармонизм колебаний ионов в кристаллической решетке. Механизм этого рассеяния заключается в следующем. Рассмотрим бегущую звуковую волну с волновым вектором q . Волна создает в кристалле области сжатия и разрежения. В результате ангармоничности колебаний (нелинейности сил взаимодействия между ионами) коэффициент сжимаемости решетки зависит от объема. Поэтому волна нарушает однородность среды: ее можно рассматривать как движущуюся дифракционную решетку, образованную чередующимися областями с различной сжимаемостью (показателем преломления), на которой рассеиваются другие волны. Таким образом, рассеяние фононов являет-

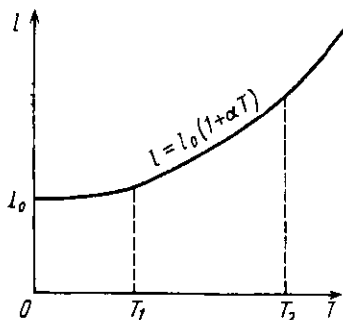


Рис. 43

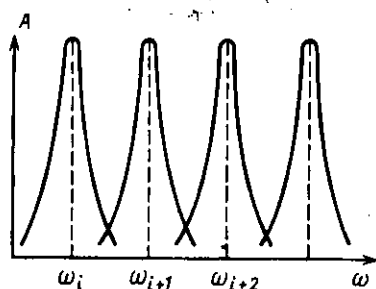


Рис. 44

ся следствием интерференции звуковых волн, вызванной нелинейностью сил связи в решетке. В процессе взаимодействия волны обмениваются энергией: две волны могут породить третью более высокой частоты или, наоборот, одна волна может распасться на две с более низкими частотами; две волны могут перейти в две другие волны с другими волновыми векторами и частотами и т. п. Этот процесс может быть описан как рассеяние двух частиц друг на друге. В результате взаимодействия двух фононов с частотами ω_1 и ω_2 возникает третий фонон с частотой ω_3 , равной сумме частот $\omega_1 + \omega_2$. Возникновение третьего фонона происходит в соответствии с законами сохранения энергии и импульса. Трехфононные процессы связаны с кубическими членами в выражении для потенциальной энергии. Члены со степенями выше третьей определяют четырехфононные и более сложные процессы рассеяния.

Переход от картины невзаимодействующих звуковых волн («гармонических» фононов) в гармоническом приближении к картине взаимодействующих звуковых волн в реальном кристал-

ле требует введения «ангармонических» фононов, так как взаимодействие фононов, в результате которого возникает передача энергии от одного фонона к другому, возможно только в том случае, когда частотный спектр каждого фонона становится непрерывным в некоторой области частот вблизи основной частоты ω_i (в гармоническом приближении частотный спектр фонона описывается δ -функцией аргумента $\omega - \omega_i$). Возможность передачи энергии от одного фонона к другому определяется перекрытием между собой областей размытия спектра различных фононов, как это схематически показано на рис. 44. Чем больше степень ангармоничности колебаний, тем сильнее перекрываются эти области, тем эффективнее происходит процесс взаимодействия между фононами и тем быстрее устанавливается тепловое равновесие в твердом теле. Надо иметь в виду, что в действительности возможность рассеяния фононов друг на друге определяется не только степенью перекрытия их спектров, но и правилами отбора, которые существенно ограничивают взаимодействие в системе фононов.

Поскольку степень ангармонизма колебаний атомов в решетке мала, особенно в области низких температур, где и применима фононная модель, удобно сохранить представление о практически идеальном газе фононов, приписывая каждому фонону некоторое эффективное сечение рассеяния. Таким образом, если невзаимодействующие гармонические фононы представляют собой идеальный газ квазичастиц бесконечно малых размеров, то ангармонические фононы можно рассматривать как слабо неидеальный газ квазичастиц с поперечником конечных размеров.

Коэффициент $\mu_{\phi-\phi}$ фонон-фононного рассеяния для такой модели имеет вид

$$\mu_{\phi-\phi} = \pi g^2 n_{\phi},$$

где n_{ϕ} — плотность фононов, а g — коэффициент ангармонизма. Длина свободного пробега фононов l_{ϕ} обратно пропорциональна $\mu_{\phi-\phi}$. При понижении температуры l_{ϕ} возрастает вследствие сильного уменьшения n_{ϕ} (эффект «вымораживания» фононов).

Все процессы взаимодействия можно разделить на две группы: нормальные процессы (N -процессы), в которых абсолютное значение волнового вектора фононов сохраняется:

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}' + \mathbf{q}'', \quad (5.7)$$

и процессы переброса (U -процессы), в которых волновой вектор фонона $\mathbf{q}''$ изменяется на вектор обратной решетки $\mathbf{g}$:

$$\mathbf{q} + \mathbf{q}' = \mathbf{q}'' + \mathbf{g}. \quad (5.8)$$

Процессы переброса описывают ситуацию, при которой вектор, равный сумме векторов взаимодействующих фононов, выходит за пределы зоны Бриллюэна и попадает, таким образом, в соседнюю.

зону. При этом выполняется условие (5.8), которое означает, что при взаимодействии фононов с волновыми векторами q и q' возникает фонон с волновыми векторами $q'' = q + q' - g$, т. е. изменение волнового вектора q на относительно малую величину q' приводит к появлению фонона с резко отличным по направлению и величине вектором q'' (рис. 45).

U -процессы можно рассматривать как рассеяние, сопровождающееся брэгговским отражением звуковой волны от решетки. При этом импульс фонона передается центру масс решетки. Заметим, что при N -процессах суммарный импульс всех фононов не изменяется, а происходит лишь перераспределение энергии в фононной системе.

Принципиальное отличие U -процессов заключается в том, что каждый из них приводит к изменению общего импульса фононной системы. Однако в состоянии равновесия вероятности процессов с изменением импульса на величину g и $-g$ одинаковы, так что в равновесных условиях в результате U -процессов общий импульс фононной системы также не изменяется.

При рассеянии фононов наиболее вероятны трехфононные процессы. Менее вероятны процессы четвертого порядка, в которых

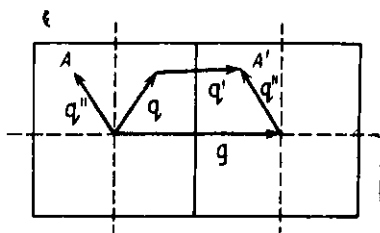


Рис. 45

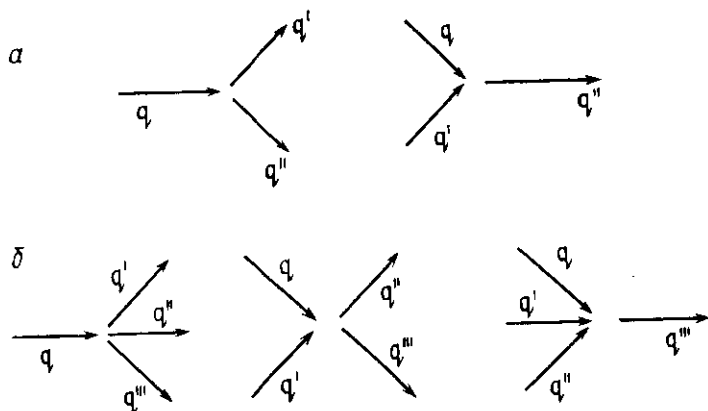


Рис. 46

взаимодействуют четыре фонона, и еще менее вероятны процессы пятого порядка. Возможные процессы 3-го и 4-го порядка пока-

заны на рис. 46, *а* и *б* соответственно (поляризация фононов при рассеянии может изменяться).

Рассмотрим более подробно трехфононные *N*-процессы. Начнем с простейшей модели для изотропного случая. Вероятность таких процессов определяется законами сохранения импульса и энергии:

$$\mathbf{q}_s + \mathbf{q}'_s = \mathbf{q}''_s; \quad \omega_s + \omega'_s = \omega''_s. \quad (5.9)$$

Индекс *s* означает одно из значений *L*, *T*₁, *T*₂.

Зададим некоторое определенное значение вектора $\mathbf{q}_s$ с энергией $\hbar\omega_s$ и посмотрим, какие требования накладываются на вектор $\mathbf{q}'_s$ с энергией $\hbar\omega'_s$ и вектор $\mathbf{q}''_s$ с энергией $\hbar\omega''_s$. Энергии $\hbar\omega'_s$ соответствует множество векторов $\mathbf{q}'_s$, концы которых расположены на трех поверхностях постоянной частоты $\omega'_L, \omega'_{T_1}, \omega'_{T_2} = \text{const}$ (для изотропной модели — на сферах): для одной ветви продольных (*L*) и двух ветвей поперечных (*T*₁ и *T*₂) фононов. Аналогично энергия $\hbar\omega''_s$ определяет три поверхности постоянной частоты, которые задают все возможные значения векторов $\mathbf{q}''_L, \mathbf{q}''_{T_1}$ и $\mathbf{q}''_{T_2}$ продольных и поперечных фононов с энергией $\hbar\omega''_s$.

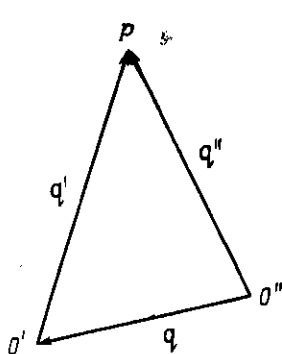


Рис. 47

Из всего множества векторов $\mathbf{q}'_s$ и $\mathbf{q}''_s$ закону сохранения импульса удовлетворяют только те векторы, которые образуют с вектором $\mathbf{q}$ замкнутый треугольник (рис. 47).

Для того чтобы найти эти векторы, поместим начало системы координат, в которой построены поверхности $\omega'_s = \text{const}$, в точку *O'*, а начало системы координат, где построены поверхности $\omega''_s = \text{const}$, в точку *O''* (рис. 48). Концы векторов $\mathbf{q}'_s$ расположены на одной из поверхностей $\omega'_s = \text{const}$, а концы векторов $\mathbf{q}''_s$ — на одной из поверхностей $\omega''_s = \text{const}$. В то же время, в соответствии с законом сохранения

импульса они должны сходиться в общей точке *P*. Этому требованию удовлетворяют векторы, концы которых образуют геометрическое место точек, расположенных на линиях пересечения поверхностей $\omega'_s, \omega''_s = \text{const}$.

Сечения поверхностей постоянной частоты, построенных вокруг точек *O'* и *O''*, плоскостью, проходящей через вектор $\mathbf{q}_L$, изображены на рис. 48. Точки пересечения окружностей $\omega'_L = \text{const}$ с $\omega'_{T_1} = \text{const}$ и $\omega'_{T_2} = \text{const}$, а также $\omega''_{T_1} = \text{const}$ и $\omega''_{T_2} = \text{const}$ дают разрешенные значения волновых векторов фононов в плоскости сечения. Единственными разрешенными процессами рассеяния являются $\mathbf{q}_L + \mathbf{q}'_{T_1} \rightarrow \mathbf{q}''_L$ и $\mathbf{q}_L + \mathbf{q}'_{T_2} \rightarrow \mathbf{q}''_{T_1}$.

Используя диаграмму, приведенную на рис. 49, легко проанализировать, как будут меняться правила отбора, если изменять параметры взаимодействующих фононов. Например, если, не изменяя энергии фононов, уменьшить скорость поперечных фононов ветви T_1 (при этом уменьшается наклон кривой T_1 и точка

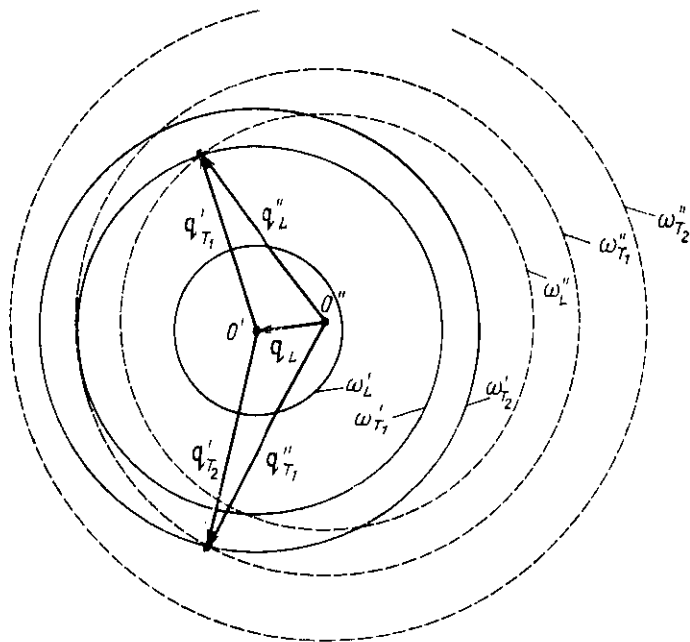


Рис. 48

q'_{T_1} смещается по оси абсцисс вправо, сначала приближаясь, а затем удаляясь от точки q_L''), то, как только расстояние $|q'_{T_1} - q_L''|$ превысит q_L , процессы рассеяния типа $q_L + q'_{T_1} \rightarrow q_L''$ станут невозможными. Если же увеличить скорость v_T , то начиная с некоторого значения v_{T_1} , когда расстояние между точками q'_L и q''_{T_1} превышает q_L , процессы типа $q_L + q'_{T_1} \rightarrow q_L''$ также станут невозможными. Нетрудно проследить также зависимость правил отбора от энергии $\hbar\omega_L$, $\hbar\omega'$, степени дисперсии и т. д.

В общем случае можно сформулировать следующее правило: если расстояние между какими-либо двумя поверхностями постоянной частоты $\omega'_s = \text{const}$ и $\omega''_s = \text{const}$, построенными на основании диаграммы, изображенной на рис. 49, превышает q_L , то процессы рассеяния типа $q_L + q'_s \rightarrow q''_s$ (т. е. с участием соот-

ветствующих этим поверхностям фононов) невозможны. Фонон q_L может рассеиваться только с участием фононов, которым соответствуют поверхности постоянной частоты: $\omega'_s = \text{const}$ и $\omega''_s = \text{const}$, расположенные на расстоянии друг от друга меньше, чем q_L .

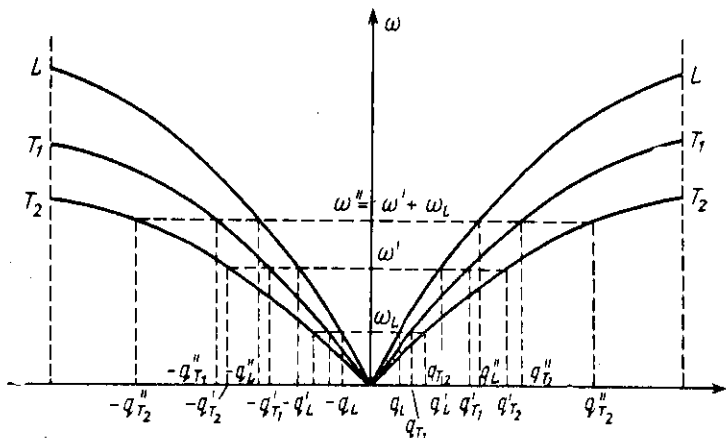


Рис. 49

В общем случае, когда фононный спектр не изотропен, правила отбора определяются аналогичным образом: задается вектор q_s с энергией $\hbar\omega_s$. Задается $\hbar\omega'$ и строятся вокруг точек O' и O'' (конец и начало вектора q_s) поверхности $\omega'_s = \text{const}$ и $\omega''_s = \text{const}$. Ли-

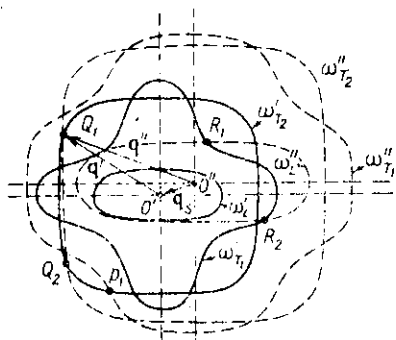


Рис. 50

нии пересечения этих поверхностей определяют разрешенные значения волновых векторов, удовлетворяющих правилам отбора. На рис. 50 в качестве примера изображено сечение поверхностей постоянной частоты плоскостью, проходящей через вектор q_s , для одного из случаев анизотропного закона дисперсии. Точка P_1 обозначает след линии пересечения поверхностей $\omega''_{T_1} = \text{const}$ с $\omega''_{T_2} = \text{const}$, точки $R_i - \omega_L'' = \text{const}$ с $\omega_{T_1} = \text{const}$, $Q_i - \omega_{T_2}' = \text{const}$ с $\omega_{T_1}' = \text{const}$. Соответствующие правила имеют вид

$$q_L + q'_{T_2} \rightarrow q''_{T_1},$$

$$q_L + q'_{T_1} \rightarrow q''_L,$$

$$q_L + q'_{T_2} \rightarrow q''_{T_1}.$$

Вероятность трехфононных процессов взаимодействия с участием продольного фонона при малых по сравнению с размерами зоны Бриллюэна $|q_L|$ уменьшается с $|q_L|$ по линейному или квадратичному закону или же вообще не зависит от величины $|q_L|$. Поскольку при температуре T возбуждаются в основном фононы с энергией $\hbar\omega_s \leq kT$ (при малых $|q_s|$ $\omega_s = v_s q_s$ и $q_s = \frac{\hbar\omega_s}{\hbar v_{3B}} \approx \frac{kT}{\hbar v_{3B}}$), то волновой вектор фононов, возбужденных при температуре T , пропорционален T . Отсюда следует важный вывод: в металлах при низких температурах вероятность процессов взаимодействия, в которых принимает участие длинноволновой продольный фонон, зависит от температуры. В большинстве случаев вероятность взаимодействия пропорциональна T^2 , хотя она может быть пропорциональна T^1 или же совсем не зависеть от температуры. Рассмотрение четырехфононных процессов взаимодействия в достаточно наглядной форме практически невозможно. Поэтому мы хотели бы только отметить, что, несмотря на то что удельный вес четырехфононных процессов во взаимодействии фононов значительно меньше, чем трехфононных, в тех случаях, когда правила отбора для трехфононных процессов оказываются очень жесткими (вероятность взаимодействия $\sim T^2$), число их при низких температурах столь мало, что четырехфононные процессы могут давать сравнимую частоту переходов.

Оценим теперь температурную зависимость частот фонон-фононного рассеяния. Если бы все фононы могли рассеиваться друг на друге, то частота рассеяния, как и для классического газа, была бы пропорциональна числу рассеивающих центров, т. е. числу частиц. Однако при рассеянии фононов необходимо учитывать правила отбора, которые ограничивают вероятность рассеяния.

Число фононов при высоких ($T > \bar{\theta}_D$) температурах пропорционально T , при низких ($T \ll \bar{\theta}_D$) — пропорционально T^3 . Как указывалось выше, правила отбора для поперечных фононов не дают зависящей от температуры поправки к числу процессов рассеяния. Для продольных длинноволновых фононов (т. е. при $T \ll \bar{\theta}_D$) число разрешенных процессов рассеяния изменяется пропорционально T^2 или T . Это означает, что если бы число фононов было постоянно, то частота рассеяния убывала бы с понижением температуры, как T^2 или T . В действительности при низких температурах число фононов T^3 . Поэтому частота рассеяния должна изменяться пропорционально T^5 или T^4 .

Таким образом, частота $\nu_{\text{ф-ф}}$ фонон-фононного рассеяния для нормальных процессов зависит от температуры следующим образом:

$\nu_{\Phi-\Phi}$ в трехфоонных процессах	$T > \bar{\theta}_D$	$T < \bar{\theta}_D$
С участием продольных фононов Для поперечных фононов	$\sim T$ $\sim T$	$\sim T^6$ или $\sim T^4$ $\sim T^3$

Вероятность процессов переброса при высоких температурах такая же, как и N -процессов: при больших q и q' равновероятно, что их сумма дает вектор, расположенный внутри зоны Бриллюэна или же выходящий за ее пределы. Поэтому вероятность процессов переброса при $T > \bar{\theta}_D$ с участием продольных и поперечных фононов пропорциональна T , т. е. $\nu_{\Phi-\Phi}^U \sim \frac{1}{\tau_{\Phi-\Phi}^U} \sim T$.

При понижении температуры число фононов с векторами q_s и q'_s уменьшается. Для низких температур, т. е. температур, при которых тепловая энергия kT много меньше энергии фононов $\hbar\omega_s$ и $\hbar\omega'_s$, число фононов в каждой моде колебаний с волновыми векторами q_s и q'_s равно соответственно

$$n(q_s) \simeq e^{-\frac{\hbar\omega_s}{kT}} \text{ и } n(q'_s) \simeq e^{-\frac{\hbar\omega'_s}{kT}}.$$

Вероятность процессов переброса пропорциональна произведению вероятностей чисел заполнения:

$$\nu_{\Phi-\Phi}^U \sim n(q_s) \cdot n(q'_s) \sim e^{-\frac{\hbar\omega'_s + \hbar\omega_s}{kT}}. \quad (5.10)$$

Учитывая закон сохранения энергии

$$\hbar\omega_s + \hbar\omega'_s = \hbar\omega''_s,$$

находим

$$\nu_{\Phi-\Phi}^U \sim \frac{1}{\tau_{\Phi-\Phi}^U} \sim e^{-\frac{\hbar\omega''_s}{kT}}, \quad (5.11)$$

где вектор q'' находится из соотношения

$$q + q' = q'' + g$$

(g — вектор обратной решетки). Чтобы процессы переброса были возможны (см. рис. 45), сумма векторов $|q + q'|$ должна хотя бы немного превышать $\left|\frac{g}{2}\right|$. Поэтому вектор $|q''|$ также должен

иметь величину порядка $\left|\frac{g}{2}\right|$. Фонону с вектором $\left|\frac{g}{2}\right|$ соответствует предельная частота $\omega_{\max} \sim \frac{k\bar{\theta}_D}{\hbar}$. Следовательно, $\hbar\omega''_s \sim \hbar\omega_{\max} \sim k\bar{\theta}_D$ или $\hbar\omega''_s \sim \beta k\bar{\theta}_D$, где β — коэффициент порядка единицы. Подставляя в (5.11), находим

$$\nu_{\Phi-\Phi}^U \sim \frac{1}{\tau_{\Phi-\Phi}^U} \sim e^{-\frac{\beta\bar{\theta}_D}{T}}. \quad (5.12)$$

ЧАСТЬ II

СИСТЕМА ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

Глава I

ЭЛЕКТРОНЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

Как уже отмечалось, наиболее характерные свойства металлов связаны с наличием коллективизированных электронов, появляющихся в результате перекрытия внешних электронных оболочек у атомов кристалла. Коллективизированные электроны не связаны с определенными атомами решетки и могут перемещаться по всему объему металла. Это означает, что весь объем металла должен оказывать влияние на формирование энергетического спектра электронов. Влияние объема можно учесть, если рассматривать коллективизированные электроны внутри потенциального ящика, ограниченного поверхностью кристалла. Поскольку валентные электроны взаимодействуют друг с другом и с кристаллической решеткой, их поведение существенно отличается от поведения свободных электронов в вакууме.

Невозможность строгого учета всех видов взаимодействия требует привлечения определенных модельных представлений. Поэтому мы попытаемся последовательно выяснить, при каких предположениях может быть рассмотрено и какую роль в формировании свойств электронов играет:

- а) наличие потенциального ящика, соответствующего размерам кристалла;
- б) кулоновское взаимодействие между электронами;
- в) взаимодействие электронов с кристаллической решеткой.

§ 1. ЭЛЕКТРОНЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНОМ ЯЩИКЕ

Рассмотрим поведение невзаимодействующих электронов (идеального электронного газа) в потенциальном ящике с размерами L_x , L_y и L_z по трем взаимно перпендикулярным осям.

Каждый электрон в такой модели представляет собой частицу с зарядом $-e$, спином $\hbar/2$, массой m_0 , импульсом p и кинетической энергией $\epsilon = \frac{p^2}{2m_0}$. Волновая функция ψ^0 свободного электрона — это плоская волна

$$\psi^0(\mathbf{r}) = Ae^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1.1)$$

где волновой вектор $\mathbf{k}$ связан с импульсом $\mathbf{p}$ соотношением $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, A — нормировочный множитель.

Чтобы не рассматривать процессы на границах потенциально-го ящика, введем циклические граничные условия

$$\psi^0(x, y, z) = \psi^0(x + L_x, y, z) = \psi^0(x, y + L_y, z) + \psi^0(x, y, z + L_z) \quad (1.2)$$

и будем считать, что функция $\psi^0(r)$ определена теперь во всем пространстве.

Подставляя (1.1) в (1.2), получим

$$e^{ik_x L_x} = e^{ik_y L_y} = e^{ik_z L_z} = 1, \quad (1.3)$$

откуда следуют условия для компонентов волнового вектора

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z, \quad (1.4)$$

где $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Таким образом, следствием ограниченных размеров кристалла является то, что волновой вектор k и импульс электрона $p = \hbar k$ могут принимать только дискретные значения (1.4).

Квазинепрерывность означает, что разность между соседними векторами p порядка обратных размеров кристалла $\frac{2\pi\hbar}{L_x}, \frac{2\pi\hbar}{L_y}, \frac{2\pi\hbar}{L_z}$ не только весьма мала по сравнению с величиной самого вектора $|p|$, но и сравнима с величиной неопределенности значения $|p|$, вытекающей из соотношения Гейзенберга $\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar$. Однако квазидискретность волнового вектора, являющаяся следствием условий циклическости, определяет число электронных состояний в кристалле и играет важную роль в формировании энергетического спектра электронов.

В пространстве волновых векторов на каждое разрешенное состояние приходится объем $\frac{(2\pi)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V}$ (V — объем кристалла). В пространстве импульсов этот объем составляет $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$.

Согласно принципу Паули, в каждом состоянии могут находиться только два электрона с противоположно направленными спинами. Это обстоятельство приводит к характерному для ферми-газа распределению частиц по энергетическим состояниям. Разрешенные значения энергии электрона легко найти, подставляя в выражение

$$\epsilon = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

полученные значения волнового вектора (1.4):

$$p^2 = \left(\frac{2\pi\hbar}{L_x} \right)^2 n_x^2 + \left(\frac{2\pi\hbar}{L_y} \right)^2 n_y^2 + \left(\frac{2\pi\hbar}{L_z} \right)^2 n_z^2.$$

Полагая для простоты $L_x=L_y=L_z$, находим

$$\varepsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{(2\pi\hbar)^2 n^2}{2m_0 V^{2/3}}, \quad (1.5)$$

где $V=L^3$; $n^2=n_x^2+n_y^2+n_z^2$.

В состоянии с энергией $\varepsilon_n = \frac{p_n^2}{2m_0}$ (при $p_n \gg \frac{2\pi\hbar}{L}$), одновременно может находиться только

$$N_{\varepsilon_n} \simeq 2 \frac{\frac{2\pi\hbar}{L} 4\pi p_n^2}{\left(\frac{2\pi\hbar}{L} \right)^3} = \frac{16\pi m_0 \varepsilon_n V^{2/3}}{(2\pi\hbar)^3}$$

электронов. Здесь $\frac{2\pi\hbar}{L} \cdot 4\pi p_n^2$ — объем шарового слоя радиуса $|p_n|$ с толщиной $\frac{2\pi\hbar}{L}$, а $\left(\frac{2\pi\hbar}{L} \right)^3$ — элементарный объем, соответствующий

одному разрешенному значению импульса p_n . Множитель 2 учитывает то обстоятельство, что в каждом состоянии могут находиться два электрона с противоположно направленными спинами.

Если в кристалле находится zN электронов (N — число атомов, z — их валентность), то они при абсолютном нуле температуры располагаются в пространстве импульса таким образом, чтобы все наименьшие энергетические состояния были заполнены. Это означает, что электроны при $T=0$ К заполняют в p -пространстве сферу, радиус p_F которой определяется из соотношения

$$2 \frac{\frac{4}{3} \pi p_F^3}{(2\pi\hbar)^3} \cdot V = zN$$

и составляет

$$p_F = 2\pi\hbar \left(\frac{3zN}{8\pi V} \right)^{1/3}. \quad (1.6)$$

Распределение электронов в кристалле по уровням энергии при любой температуре подчиняется статистике Ферми — Дирака, согласно которой вероятность f_{ε_n} нахождения электрона в состоянии с энергией ε_n описывается функцией

$$f_{\varepsilon_n} = [e^{\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_F}{kT}} + 1]^{-1}. \quad (1.7)$$

При $T=0$ К вероятность заполнения всех состояний с энергией $\varepsilon_n < \varepsilon_F$ равна единице, а состояний с $\varepsilon_n > \varepsilon_F$ — нулю (рис. 51). Таким образом, параметр ε_F в (1.7), который получил

название энергии Ферми, определяет граничную энергию, до которой все энергетические состояния при $T=0$ К заполнены, а выше которой — пусты.

При конечной температуре $T \neq 0$ К граница заполнения размывается на величину порядка kT , так что $f_{e_n} = \frac{1}{2}$ при $e_n = e_F$ (см. рис. 51).

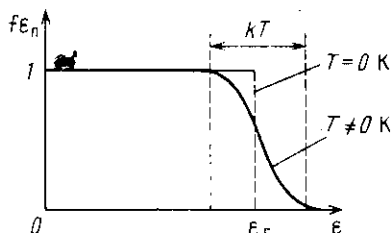


Рис. 51

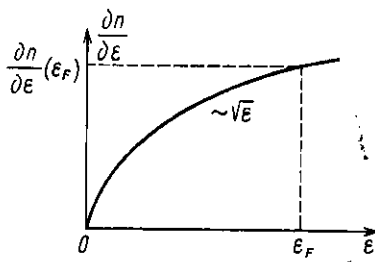


Рис. 52

Энергия Ферми e_F , соответствующая границе заполнения при $T=0$ К, может быть найдена с помощью (1.6):

$$e_F(0) = \frac{p_F^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{3\pi^2 zN}{V} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m_0} (3\pi^2 n)^{2/3}, \quad (1.8)$$

где $n = \frac{zN}{V}$ — концентрация электронов.

Энергия Ферми растет при увеличении концентрации электронов как $n^{2/3}$. Концентрацию n можно выразить через энергию Ферми:

$$n = \frac{(2m_0 e_F(0))^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (1.9)$$

Плотность электронных состояний

$$\frac{\partial n}{\partial e} = \frac{(2m_0)^{3/2} e^{1/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (1.10)$$

является монотонно растущей функцией e . Вид функции $\frac{\partial n}{\partial e}(e)$ для свободных электронов показан на рис. 52. Очевидно, площадь под кривой $\frac{\partial n}{\partial e}(e)$ в пределах от 0 до $e_F(0)$ при $T=0$ К дает полную концентрацию электронов

$$n = \frac{zN}{V} = \int_0^{e_F(0)} \frac{\partial n}{\partial e} de. \quad (1.11)$$

При конечной температуре $T \neq 0$ К необходимо учесть вероятность f_e (1.7) заполнения различных энергетических состояний. Общее выражение для концентрации электронов в этом случае имеет вид

$$n = \int_0^{\infty} f_e(\epsilon) \frac{\partial n}{\partial \epsilon} d\epsilon. \quad (1.12)$$

Поскольку концентрация n электронов в металле не зависит от температуры, сопоставляя выражения (1.11) и (1.12), можно показать, что параметр ϵ_F в распределении Ферми—Дирака (1.7) слабо уменьшается при увеличении температуры. При $T \ll \frac{\epsilon_F(0)}{k}$ зависимость ϵ_F от T определяется малой поправкой порядка $\left[\frac{kT}{\epsilon_F(0)} \right]^2$.

Величину энергии Ферми легко оценить при помощи формулы (1.8). В обычных металлах электронная плотность $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ и ϵ_F порядка нескольких электрон-вольт. Расстояния между энергетическими уровнями при $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ ничтожно малы по сравнению с величиной ϵ_F . Поэтому принято говорить, что энергетический спектр электронного газа квазинепрерывен.

§ 2. ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ КАК ФЕРМИ-ЖИДКОСТЬ

В модели идеального газа не учитывается взаимодействие электронов между собой. Однако коллективизированные электроны в металле представляют систему частиц, энергия $\frac{e^2}{r}$ кулоновского взаимодействия которых при среднем расстоянии между частицами $r \sim n^{-1/3}$ одного порядка величины с их кинетической энергией $\sim \frac{p_F^2}{2m_0}$. В связи с этим может показаться, что модель идеального газа вообще является слишком отдаленным приближением для описания свойств системы валентных электронов в металлах.

Поэтому важно выяснить, к чему в действительности приводит сильное взаимодействие частиц и какие ограничения оно накладывает на поведение электронов в металле. Способность металлов проводить электрический ток, связанная с возможностью электронов свободно перемещаться по кристаллу, указывает на то, что при обычных условиях в металле не происходит кристаллизации (затвердения) электронного газа.

Поэтому естественно предположить, что система взаимодействующих электронов в металле представляет собой электронную жидкость, состоящую из ферми-частиц.

Рассмотрим сначала различие между жидкостной и газовой моделями для электронов в металле.

В модели невзаимодействующих частиц (ферми-газ) полная энергия системы складывается из энергии отдельных частиц, а уровни энергии не зависят от числа частиц и совпадают с уровнями энергии отдельного электрона, помещенного внутрь потенциального ящика, который образован границами кристалла. При добавлении или изъятии нескольких частиц с энергией Ферми энергетические состояния других частиц в газовой модели не изменяются. Это дает возможность при построении энергетического спектра использовать одноэлектронное приближение.

В основном состоянии (при $T=0$) частицы ферми-газа заполняют все уровни энергии до значения $\varepsilon = \varepsilon_F(0)$. Заполненный объем в импульсном пространстве соответствует объему сферы

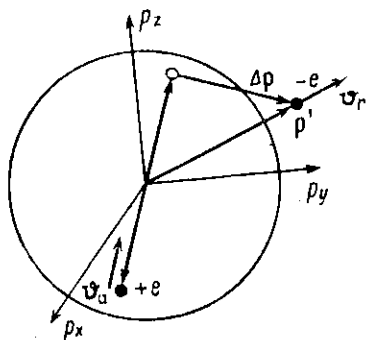


Рис. 53

Ферми, радиус p_F которой связан с числом частиц соотношением (1.6).

При возбуждении ферми-газа некоторые из частиц, получив добавочную энергию, выходят за пределы сферы Ферми. Элементарный акт возбуждения можно представить себе следующим образом (рис. 53): электрон внутри ферми-сферы приобретает дополнительный импульс Δp и переходит из состояния с импульсом p в одно из свободных состояний вне сферы с импульсом p' . Появившийся над поверхностью Ферми электрон можно рассматривать как свободную ква-

зичастицу с зарядом $-e$, массой m_0 , спином $\hbar/2$ и энергией

$$\varepsilon_r(p') = \frac{p'^2}{2m_0} - \frac{p_F^2}{2m_0}. \text{ При } p' - p_F \ll p_F$$

$$\varepsilon_r(p') \cong \frac{p'}{m_0} (p' - p_F) = v_r (p' - p_F),$$

где v_r — величина скорости частицы, направленной параллельно ее импульсу p' . Так как $|p'| > |p_F|$, то скорость $|v_r|$ несколько превышает скорость электронов $|v_F|$ на границе Ферми.

В основном состоянии импульс электронного газа равен нулю; для каждого электрона с импульсом p в пределах сферы Ферми имеется электрон с импульсом $-p$, который компенсирует движение первого. В основном (невозбужденном) состоянии равновесное распределение электронов состоит из взаимно скомпенсированных по импульсу электронных пар. Поэтому исчезновение электрона с импульсом p и зарядом $-e$ эквивалентно тому, что вся система электронов приобретает импульс $-p$ и заряд $+e$.

Таким образом, рождение квазичастицы над поверхностью Ферми сопровождается изменением энергетического состояния всей системы электронов: газ электронов, заполняющий ферми-сферу, приобретает импульс $-p$ и заряд $+e$.

Возникновение возбужденного состояния системы ($n-1$) электронов можно рассматривать как рождение второй квазичастицы с зарядом $+e$ и импульсом $-p$. Эту квазичастицу обычно принято называть античастицей^{*)}.

Квазичастицы типа античастиц имеют импульсы p меньше p_F , в результате чего их энергия ϵ должна отсчитываться в обратном направлении:

$$\epsilon_a(p) = \epsilon_F - \frac{p^2}{2m_0} = \frac{p_F^2}{2m_0} - \frac{p^2}{2m_0} = v_a(p_F - p)$$

при $p_F - p \ll p_F$. Такой отсчет энергии античастицы объясняется тем, что затрата энергии на создание античастицы растет по мере удаления в глубину от поверхности сферы Ферми. Энергия возбужденной системы, отсчитываемая от энергии ϵ_F , является суммой энергий всех квазичастиц (частиц и античастиц). В отличие от скорости частицы скорость античастицы направлена антипараллельно ее импульсу. Это связано с тем, что в выбранной системе отсчета энергия античастицы отсчитывается от энергии Ферми и возрастает при уменьшении модуля ее импульса. В результате производная $\frac{d\epsilon_a(p)}{dp}$ отрицательна.

Установление статистического равновесия в идеальном газе предполагает наличие некоторого конечного, хотя и весьма малого, взаимодействия между частицами (полное отсутствие взаимодействия между частицами превращает газ в совокупность изолированных частиц в пустом пространстве, к которым неприменимо статистическое описание: каждая частица в этом случае может рассматриваться вне всякой связи с другими). Будем характеризовать взаимодействие некоторой константой γ . Время установления статистического равновесия (время релаксации) системы возрастает при уменьшении γ и обращается в бесконечность при $\gamma \rightarrow 0$.

Поскольку любое возмущение, внесенное в систему, затухает во времени, квазичастицы как элементарные возбуждения в системе имеют конечное время τ жизни. При этом имеет смысл рассматривать квазичастицы только в том случае, если неопределенность их энергии $\hbar/\tau$ значительно меньше самой энергии ϵ_a или ϵ_F .

^{*)} Описанный механизм рождения квазичастиц при возбуждении идеального ферми-газа показывает, что «частицы» и «античастицы» всегда рождаются парами. При этом суммарный импульс «частицы» и «античастицы» всегда равен импульсу, сообщенному системе электронов извне.

Не следует смешивать «античастицы», возникающие при возбуждении заполненной сферы Ферми, с дырками, которые являются элементарными возбуждениями в том случае, когда замкнутая поверхность Ферми окружает незаполненное (пустое) пространство. Образование дырочных поверхностей Ферми связано со спецификой энергетического спектра электронов в периодической решетке и не имеет аналогий в модели идеального ферми-газа. О дырочных поверхностях Ферми и квазичастицах типа дырки см. в § 1 гл. 3.

Рассмотрим, как время жизни квазичастиц связано с константой взаимодействия γ и при каких условиях выполняются соотношения $\epsilon_r, \epsilon_a \gg \hbar/\tau_r, \hbar/\tau_a$, где τ_r, τ_a — времена жизни частиц и античастиц.

Время жизни квазичастицы в состоянии с импульсом p $|p| > |p_F|$ для частицы и $|p| < |p_F|$ (для античастицы) определяется вероятностью w перехода возбужденного электрона из рассматриваемого состояния в другие. Для оценки w достаточно рассмотреть такие процессы, при которых во взаимодействии участвуют только две частицы (процессы первого порядка по взаимодействию). Электрон, возбужденный в состояние с импульсом p_1 вне сферы Ферми, может взаимодействовать с электроном в состоянии с импульсом p_2 внутри сферы Ферми, в результате чего согласно принципу Паули обе частицы должны перейти в состояния p_1' и p_2' вне сферы Ферми. Закон сохранения импульса при этом имеет вид $p_1 + p_2 = p_1' + p_2'$. Из квантовой механики известно, что эта вероятность пропорциональна квадрату константы взаимодействия между частицами в газе и произведению числа квазичастиц на число свободных состояний, в которые квазичастицы могут переходить после рассеяния. Обе эти величины пропорциональны ширине области размытости, т. е. $p_1 - p_F$, так что $w \sim \gamma^2 (p_1 - p_F)^2$. Время жизни τ частиц (время релаксации) обратно пропорционально вероятности рассеяния

$$\tau \sim 1/w \sim \frac{1}{\gamma^2 (p - p_F)^2} \sim \frac{v_F^2}{\gamma^2 \epsilon_r^2(p)} \sim \frac{\epsilon_F}{\gamma^2 \epsilon_r^2(p)}.$$

Отсюда следует, что неопределенность энергии квазичастиц $\hbar/\tau \sim \frac{\hbar \gamma^2 \epsilon_r^2(p)}{\epsilon_F}$ меньше $\epsilon_r(p)$ только при достаточно малой разности импульсов $|p - p_F|$. По мере удаления от поверхности Ферми затухание квазичастиц возрастает, и при больших значениях $|p - p_F|$ понятие квазичастиц теряет смысл *).

Перейдем к рассмотрению ферми-жидкости.

Сильное взаимодействие между частицами в ферми-жидкости приводит к тому, что добавление или изъятие нескольких частиц меняет не только общую энергию всей системы, но и состояние всех остальных частиц системы. Жидкостная система полностью энергетически перестраивается при изменении числа частиц. Поэтому электроны, образующие ферми-жидкость, вообще говоря, нельзя рассматривать как частицы, имеющие определенные значения энергии и импульса. Поведение системы сильно взаимодействующих частиц можно описать на основе общей концепции

*) В слабо неидеальном газе с очень малой константой взаимодействия $\hbar/\tau$ может быть много меньше $\epsilon(p)$ и при $p - p_F \approx p_F$. Это означает, что описание идеального ферми-газа в терминах квазичастиц идентично описанию в терминах составляющих его частиц при любых уровнях возбуждения системы.

Ландау об энергетических спектрах конденсированных квантовых систем (теория ферми-жидкости Ландау).

В теории ферми-жидкости вводится понятие основного состояния системы (при $T=0$ К) и рассматриваются небольшие отклонения системы от основного состояния. При этом отсчет энергии ведется от энергии основного состояния.

Центральная идея теории ферми-жидкости заключается в том, что возбуждение системы, при котором отклонение от энергии основного состояния невелико, может быть описано совокупностью слабо взаимодействующих друг с другом элементарных возбуждений (квазичастиц), энергетический спектр которых подобен спектру квазичастиц, возникающих при возбуждении ферми-газа. Предполагается, что при «включении» взаимодействия между частицами в ферми-газе (увеличении γ) классификация энергетических состояний частиц (электронов) остается неизменной, т. е. состояния электрона можно по-прежнему описать заданием его квазиимпульса. Это означает, что для квазичастицы можно также ввести импульс p , который при $|p - p_F| \ll p_F$ определяет ее энергию $\epsilon(p)$ при помощи линейных соотношений

$$\epsilon_r(p) \simeq v'_r(p - p_F) \quad \text{при} \quad p > p_F,$$

$$\epsilon_a(p) \simeq v'_a(p_F - p) \quad \text{при} \quad p_F > p.$$

Параметр p_F определяется при помощи такого же выражения (1.6), как и для идеального ферми-газа.

Отличие закона дисперсии квазичастиц от аналогичных выражений для ферми-газа заключается в том, что коэффициент пропорциональности v' является некоторой неизвестной величиной, имеющей размерность скорости. Формально его можно записать в виде $v' = p_F/m'$ и тем самым ввести новый параметр — эффективную массу m' квазичастицы, которая отличается от массы m_0 свободного электрона в модели ферми-газа. Однако отличие m' от m_0 невелико и не превышает 5—20% (обычно $m' > m_0$). Изменение массы квазичастицы является результатом взаимодействия в ферми-жидкости.

Другим отличием квазичастиц от невзаимодействующих электронов является уменьшение их времени жизни вследствие увеличения константы взаимодействия γ . В сильно взаимодействующей системе, кроме рассмотренных парных, в принципе могут стать существенными процессы более высокого порядка по взаимодействию, в которых одновременно участвует большое число частиц. Однако можно показать, что вероятности таких процессов пропорциональны $(p - p_F)$ в более высоких степенях, чем вторая. Таким образом, для квазичастиц с импульсом, достаточно близким к p_F , по-прежнему доминируют процессы первого порядка по взаимодействию, и время их жизни пропорционально

$$\frac{1}{\gamma^2 (p - p_F)^2} \sim \frac{\epsilon_F}{\gamma^2 \epsilon_F^2 (p)}.$$

Таким образом, квазичастицы как элементарные возбуждения ферми-жидкости, для которых справедливо условие $\epsilon(p) \gg \hbar/\tau$, существуют только при $|p - p_F| \ll p_F$. Времена жизни квазичастиц быстро уменьшаются при увеличении их импульса. Эта особенность квазичастиц в ферми-жидкости связана с большой величиной константы взаимодействия γ составляющих жидкость частиц. Именно это не позволяет в жидкостной модели реализовать высокие уровни возбуждения, сохраняя представление о квазичастицах. Если в модели идеального газа при $\gamma \rightarrow 0$ квазичастица, по существу, идентична электрону и имеет закон дисперсии $\epsilon(p) = \frac{p^2}{2m_0} - \epsilon_F(0)$ при любых значениях импульса (он сводится к выражению $\epsilon(p) = v'(p - p_F)$ только при $|p - p_F| \ll p_F$), то квазичастица в модели ферми-жидкости не имеет ничего общего с частицами жидкости. Она может быть описана при помощи закона дисперсии $\epsilon(p) \simeq v'(p - p_F)$ только при весьма малых значениях $|p - p_F|$. В газовой модели (при исчезающе малой константе взаимодействия) при высоких уровнях возбуждения число квазичастиц сравнивается с общим числом частиц в системе и квазичастица становится идентичной обычному электрону в возбужденном состоянии. В модели ферми-жидкости при высоких уровнях возбуждения представление о газе квазичастиц теряет смысл, и мы приходим к исходной системе сильно взаимодействующих частиц, которую нужно рассматривать строго без каких-либо упрощений.

При низких уровнях возбуждения ферми-жидкости (пока число квазичастиц мало) квазичастицы слабо взаимодействуют друг с другом и образуют слабо неидеальный газ элементарных возбуждений. Таким образом, элементарные возбуждения можно рассматривать как разряженный «пар» над поверхностью ферми-жидкости, взаимодействие между частицами которого достаточно мало. Энергия возбуждения системы при этом складывается из энергий отдельных квазичастиц.

Концепция введения квазичастиц для описания возбужденного состояния системы электронов в металле аналогична концепции введения фононов — газа слабо взаимодействующих квазичастиц, описывающих возбужденное состояние кристаллической решетки.

Напомним, что фононы (при низких температурах $T < \theta_D$) представляют собой кванты энергии теплового возбуждения кристаллической решетки в целом как системы сильно взаимодействующих частиц. Повышение температуры приводит к генерации в такой системе низкочастотных мод колебаний, на каждую из которых приходится средняя энергия порядка kT .

При низких температурах, соответствующих малым амплитудам тепловых колебаний атомов в решетке, когда справедливо гармоническое приближение и число возбужденных мод мало по сравнению с общим числом атомов в решетке, фононы представляют собой систему очень слабо взаимодействующих частиц, об-

разующих почти идеальный газ. Ангармонизм колебаний, роль которого сильно возрастает при увеличении температуры, увеличивает взаимодействие между фононами, что в принципе делает фононный газ все более неидеальным. Именно поэтому концепция фононов как системы слабо взаимодействующих квазичастиц справедлива только при достаточно низких температурах, когда тепловая энергия решетки является суммой энергий возбужденных фононов, а слабость взаимодействия между фононами позволяет считать, что при изменении числа фононов энергетические состояния (уровни) всей фононной системы не изменяются.

Итак, введение квазичастиц позволяет описывать реальную электронную систему в металлах (ферми-жидкость) при помощи слабо неидеального газа элементарных возбуждений с эффективной массой m' . Такие квазичастицы переносят электрический заряд, равный заряду электрона ($-e$ у частицы и $+e$ у античастицы), и описываются статистикой Ферми — Дирака. Закон дисперсии квазичастиц в модели ферми-жидкости при $|p - p_F| \ll p_F$ можно записать в виде

$$\varepsilon(p) = \frac{p^2}{2m'} - \frac{p_F^2}{2m'} = \frac{p^2}{2m'} - \varepsilon_F(0).$$

Это означает, что в изотропной ферми-жидкости квазичастицы описываются, как и частицы идеального газа, квадратичным законом дисперсии $\frac{p^2}{2m'}$. Вся особенность жидкостной модели при низких уровнях возбуждения заключается только в отличии m' от массы свободного электрона.

В равновесной ферми-жидкости при конечной температуре квазичастицы имеют энергию порядка kT . Неопределенность энергии $\hbar/\tau$ при этом имеет порядок $\gamma^2(kT)^2/\varepsilon_F$ и достаточно мала при выполнении неравенства $kT \ll \varepsilon_F(0)$. Из этого условия следует, что концепция квазичастиц в действительности применима к металлам при любых температурах вплоть до температуры плавления, ибо $\varepsilon_F(0)/k$ по порядку величины составляет $(10^4 - 10^5)$ К.

Отметим еще одно обстоятельство, связанное с концепцией квазичастицы, позволяющей описывать возбужденные состояния реальной электронной системы в металле идеальным (слабо неидеальным) газом элементарных возбуждений.

Дело заключается в том, что по идее Ландау взаимодействие квазичастиц может быть учтено введением некоторого самосогласованного поля от окружающих квазичастиц, действующих на данную. При этом, очевидно, энергия квазичастицы будет зависеть от состояния других квазичастиц, т. е. будет функционалом от их функции распределения. Однако для описания спектра квазичастиц используется газовая модель, в которой не учитывается зависимость энергетического спектра от функции распределения. Это на самом деле, за редкими исключениями, не является существенным. В ряде случаев оно вообще не влияет на результаты опи-

сания, в других — не меняет порядок величины результата. Но существуют явления, которые происходят исключительно вследствие зависимости энергетического спектра квазичастиц от функции распределения. Эти явления носят название ферми-жидкостных эффектов. К таким эффектам относится, например, влияние взаимодействия квазичастиц на парамагнитную восприимчивость металлов, близких по своим свойствам к ферромагнетикам. Ферми-жидкостные эффекты приводят к некоторому изменению (перенормировка) спиновой массы электрона по сравнению с аналогичной величиной в газовой модели, а также к некоторым особенностям распространения электромагнитных и спиновых волн в металлах на частотах ω , больших частоты $1/\tau$ электронной релаксации. Детальное описание ферми-жидкостных эффектов выходит за рамки настоящей книги.

§ 3. ПОВЕРХНОСТЬ ФЕРМИ

Сравним две модели: модель ферми-газа и модель ферми-жидкости.

В первом случае n электронов заполняют при $T=0$ К сферу с радиусом p_F . Возбужденный электрон переходит на один из свободных уровней, расположенных выше ϵ_F , и ведет себя как частица с зарядом $-e$, спином $\hbar/2$, массой m_0 и импульсом p , определяющим ее положение в p -пространстве. Античастица имеет заряд $+e$, массу m_0 , спин $\hbar/2$. При $\gamma=0$ время жизни частиц равно бесконечности.

Во втором случае электроны, вообще говоря, нельзя рассматривать как частицы. Однако при $T=0$ К они заполняют в p -пространстве такой же объем с радиусом p_F , как и свободные электроны. Возбужденное состояние ферми-жидкости описывается слабо взаимодействующими квазичастицами с зарядами $-e$ и $+e$, спином $\hbar/2$, массами m_r' и m_a' и временами жизни τ_r и τ_a , зависящими от γ и энергии возбуждения. Положение квазичастиц в p -пространстве также можно характеризовать квазиимпульсом p . Таким образом, обе модели отличаются только величиной массы и временем жизни возбужденных состояний. Если в газовой модели заменить m_0 на m' и рассматривать только процессы, при которых $|p-p_F| \ll p_F$, то она будет так же хорошо описывать явления, как ферми-жидкостная. Различие между моделями начинает проявляться только при более высоких энергиях $\Delta\epsilon$ возбуждения, когда условие $\Delta\epsilon \ll \epsilon_F$ или $|p-p_F| \ll p_F$ перестает выполняться. Однако для металлов это условие не является жестким и обычно выполняется при взаимодействии электронов с электрическим, магнитным и тепловым полями.

Оценим возможную величину изменения энергии электронов при таких взаимодействиях.

Приращение энергии $\Delta\epsilon$ электрона в электрическом поле E на длине l свободного пробега (за время τ) равно $|e|El$ и обычно не превышает 10^{-4} — 10^{-6} эВ.

При движении электрона в магнитном поле $\mathbf{H}$ энергия в классическом приближении не меняется, так как действующая на заряд сила Лоренца $\mathbf{F}_H = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}]$ направлена всегда перпендикулярно скорости движения $\mathbf{v}$. Изменение $\Delta\epsilon$ энергии электрона в магнитном поле связано с квантовыми эффектами и равно $\hbar\omega_c$. Величина $\omega_c = \frac{|e|\hbar}{m_0c}$ носит название циклотронной частоты.

Достижимые экспериментально магнитные поля обычно не превосходят $\sim 10^6$ Э. Изменение энергии в таких полях для большинства металлов не превосходит $10^{-3} \epsilon_F$.

При взаимодействии с колебаниями решетки при температуре T энергия электрона изменяется на величину порядка kT ($kT \sim \sim 0,03$ эВ при комнатной температуре). Следовательно, даже при максимальных температурах, при которых металл еще остается твердым ($T \sim 2000$ К), отношение kT/ϵ_F не превышает 0,05.

Приведенные оценки показывают, что условие $\Delta\epsilon \ll \epsilon_F$ обычно выполняется и во взаимодействии с внешними полями принимает участие лишь небольшая часть Δn частиц, расположенных в узком энергетическом слое вблизи уровня Ферми. Это позволяет упростить описание электронной системы в металлах. Вместо того чтобы определить закон дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ в общем виде во всем пространстве импульсов, достаточно определить связь между энергией и импульсом при постоянном значении энергии $\epsilon = \text{const} = \epsilon_F$.

Уравнение $\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon_F$ в пространстве импульсов определяет поверхность постоянной энергии, которая носит название поверхности Ферми. Поверхности Ферми у металлов могут иметь очень сложный вид. При малых энергиях возбуждения поверхность Ферми может рассматриваться как жесткий «каркас». Форма поверхности Ферми и характер ее изменения при небольших вариациях энергии Ферми полностью определяют свойства электронов с энергией.

§ 4. ОДНОЭЛЕКТРОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Наиболее важным результатом, вытекающим из теории изотропной ферми-жидкости, является возможность замены сильно взаимодействующих электронов, расположенных вблизи сферы Ферми (электронов с энергией, близкой к ϵ_F), почти идеальным газом элементарных возбуждений типа частиц ($-e$) и античастиц ($+e$).

Важно подчеркнуть, что квадратичный закон дисперсии квазичастиц является следствием изотропности ферми-жидкости, т. е. сферической формы поверхности Ферми. Полученная модель позволяет независимо от того, рассматриваем ли мы частицы или античастицы, исходить при построении энергетического спектра металлов из одноэлектронного приближения, т. е. рассматривать движение одной свободной частицы в периодическом поле кристал-

лической решетки. Взаимодействие квазичастицы с решеточным потенциалом изменяет первоначальный квадратичный закон дисперсии: в результате этого взаимодействия формируется сложный многозонный энергетический спектр. При этом оказывается возможным проследить, как исходный квадратичный закон дисперсии квазичастицы преобразуется в спектр частицы в кристаллической решетке. Поскольку квазичастицы не взаимодействуют между собой, построенный таким образом спектр является спектром для всех квазичастиц и энергий $\varepsilon \approx \varepsilon_F$.

В дальнейшем изложении при построении электронных спектров мы будем называть квазичастицы в металле просто электронами, учитывая при этом все особенности, связанные с квазичастичным описанием электронной системы.

Прежде всего обратим внимание на то, что в результате большой величины энергии Ферми скорость электронов, расположенных на поверхности Ферми, весьма велика и составляет около 10^8 см/с.

Эта скорость значительно превышает скорость теплового движения ионов в решетке, которая для $\omega_{\text{ион}} \sim 10^{13}$ с⁻¹ при амплитуде колебаний порядка 10^{-9} см равна приблизительно 10^5 см/с.

Большое различие в скоростях движения электронов и ионов позволяет использовать при рассмотрении взаимодействия электронов с решеткой так называемое адиабатическое приближение. Смысл адиабатического приближения заключается в предположении, что движение электронов определяется мгновенным расположением ионов, тогда как на движение последних влияет лишь пространственное распределение электронного заряда, усредненное за период времени, превосходящий характерные для электронов временные интервалы *).

Распределение электронного заряда перестраивается в соответствии с медленным движением ионов, адиабатически следуя за ним. Поэтому в первом приближении можно рассматривать неподвижные ионы. При этом взаимодействие электронов с решеткой складывается из рассеяния электронов на периодическом потенциале неподвижных ионов $V_{ie}(r)$, поляризации решетки движущимися электронами и рассеяния электронов на фононах.

Рассмотрим теперь, каким образом осуществляется переход от многоэлектронной задачи к одноэлектронному приближению. Обратим внимание на то, что каждый отдельный электрон в решетке находится в поле, потенциал которого создается не только ионами решетки, но и всеми остальными $(n-1)$ электронами. Эта последняя часть потенциала для электрона с номером j имеет вид

$$V_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|},$$

*) Характерным для электронов временным интервалом может считаться время 10^{-16} с, за которое фермиевский электрон, имеющий скорость $v_F \sim 10^8$ см/с, проходит расстояние $\sim 10^{-8}$ см, порядка размеров элементарной ячейки кристалла.

где суммирование ведется по координатам r_i электронов при $i \neq j$. Очевидно, что V_{ee} зависит от мгновенного расположения всех остальных электронов.

Переход к одноэлектронной задаче возможен только в приближении, при котором потенциал V_{ee} , создаваемый $(n-1)$ электронами, заменяется некоторым эффективным потенциалом $V_{ee}^{\text{эф}}$, описывающим усредненное действие всех остальных электронов на данный. Такая замена носит название приближения самосогласованного поля и лежит в основе метода Хартри — Фока.

Важным следствием приближений самосогласованного поля является возможность приписать каждому электрону индивидуальную волновую функцию $\psi(r)$, которая удовлетворяет одноэлектронному уравнению Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m'} \nabla^2 + V_{ee}^{\text{эф}}(r) + V_{ie}(r) \right] \psi(r) = \epsilon \psi(r), \quad (1.13)$$

где $V_{ie}(r)$ — потенциал взаимодействия электрона с ионами, а потенциал $V_{ee}^{\text{эф}}(r)$ представляет собой взаимодействие данного электрона с полем, создаваемым размазанным зарядом остальных $(n-1)$ электронов. На основе адиабатического приближения можно утверждать, что распределение средней электронной плотности в кристалле всегда определяется расположением ионов в решетке. Поэтому потенциал $V_{ee}^{\text{эф}}(r)$, как и потенциал $V_{ie}(r)$, является периодической функцией с периодом, равным периоду кристаллической решетки. Их сумма образует самосогласованный периодический решеточный потенциал $V(r) = V_{ie}(r) + V_{ee}^{\text{эф}}(r)$, который входит в уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m'} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = \epsilon \psi(r), \quad (1.14)$$

описывающее волновую функцию электрона в металле.

§ 5. ЭЛЕКТРОН В ПОЛЕ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА. ТЕОРЕМА БЛОХА

Прежде всего рассмотрим наиболее общий, не зависящий от вида и величины самосогласованного периодического решеточного потенциала вид волновой функции электрона, являющейся решением уравнения Шредингера (1.14).

Периодический характер потенциала $V(r)$ приводит к условию трансляционной инвариантности для волновой функции электрона

$$|\psi(r)|^2 = |\psi(r+a)|^2, \quad (1.15)$$

где вектор $a = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3$ строится из векторов основных трансляций в решетке a_1, a_2, a_3 ; n_1, n_2, n_3 — целые числа.

Условие (1.15) соответствует тому, что плотность вероятности нахождения электрона представляет собой периодическую функ-

цию с периодом решетки. Иными словами, условие (1.15) означает, что точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r} + \mathbf{a}$ в решетке физически эквивалентны.

Как и прежде, влияние границ кристалла можно устранить введением циклических граничных условий, которые эквивалентны периодическому повторению кристалла во всех направлениях.

Волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, удовлетворяющие уравнению (1.14), должны быть пропорциональны друг другу:

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = C(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}). \quad (1.16)$$

Из условия (1.15) следует, что

$$|C(\mathbf{a})|^2 = 1. \quad (1.17)$$

Переход из точки $\mathbf{r}$ в точку $\mathbf{r} + \mathbf{a}$ можно совершить либо непосредственно, либо путем двух последовательных трансляций на векторы $\mathbf{a}'$, $\mathbf{a}''$, удовлетворяющие условию $\mathbf{a} = \mathbf{a}' + \mathbf{a}''$. Волновую функцию $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ в этих случаях можно представить либо как

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = C(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}),$$

либо как

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = C(\mathbf{a}') \cdot C(\mathbf{a}'')\psi(\mathbf{r}).$$

Отсюда

$$C(\mathbf{a}) = C(\mathbf{a}') \cdot C(\mathbf{a}'').$$

Последнему условию вместе с (1.17) удовлетворяет функция вида

$$C(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}},$$

где $\mathbf{k}$ — некоторый действительный вектор.

Итак, при сдвиге аргумента на вектор $\mathbf{a}$ волновая функция преобразуется следующим образом:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.18)$$

Индекс $\mathbf{u}$ волновой функции указывает вектор $\mathbf{k}$, которому она соответствует.

Условию (1.18) удовлетворяет также функция более общего вида:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (1.19)$$

Сдвигая аргумент этой функции на $\mathbf{a}$ и сравнивая полученное выражение с исходным с учетом (1.18), легко убедиться, что функция $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ также является периодической с периодом основных трансляций решетки

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.20)$$

Тот факт, что волновую функцию электрона в кристалле можно записать в виде (1.19), является общим следствием трансляционной симметрии решетки и составляет содержание теоремы Блоха. Выражение (1.19) означает, что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ имеет вид плоской волны, промодулированной с периодом решетки.

§ 6. КВАЗИИМПУЛЬС ЭЛЕКТРОНА В РЕШЕТКЕ

Из вида волновой функции Блоха (1.19) и циклических граничных условий следует, что квазиволновой вектор электрона в решетке, как и волновой вектор электрона, заключенного в потенциальный ящик конечных размеров, является дискретной величиной. Компоненты квазиволнового вектора, очевидно, определяются выражениями (1.4).

Таким образом, компоненты квазиимпульса электрона в решетке могут быть записаны в виде

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L_z} n_z, \quad (1.21)$$

где L_x, L_y, L_z — размеры кристалла, а $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$.

Известно, что законы сохранения физических величин связаны с определенными свойствами симметрии пространства и времени. Так, закон сохранения импульса частицы $\mathcal{P}$ в свободном пространстве является следствием его однородности. Изотропность свободного пространства приводит к закону сохранения момента количества движения $\mathbf{M} = [\mathcal{P}\mathbf{r}]$. Из однородности времени вытекает закон сохранения энергии.

В кристаллической решетке однородность пространства отсутствует, так как потенциальная энергия $V(\mathbf{r})$ является периодической функцией координат: $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{a})$. С этим свойством потенциала связан новый вид симметрии пространства кристаллической решетки, называемой трансляционной инвариантностью. Выясним, какой закон сохранения соответствует этому виду симметрии.

Из квантовой механики известно, что не зависящая явно от времени некоторая величина $\hat{f}$ сохраняется, если соответствующий ей оператор $\hat{f}$ коммутирует с оператором Гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$. Так, в частности, сохранение собственного значения импульса $\mathcal{P}$ при движении электрона в свободном пространстве является следствием того, что оператор импульса $\hat{\mathcal{P}} = -i\hbar\nabla$ коммутирует с оператором Гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$, совпадающим в этом случае с оператором кинетической энергии

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2m_0} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2.$$

Для того чтобы выяснить, какая физическая величина сохраняется при движении электрона в поле решеточного потенциала $V(\mathbf{r})$, определим, какой оператор $\hat{f}$ коммутирует с оператором Гамильтона

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m'} \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (1.22)$$

где $V(\mathbf{r})=V(\mathbf{r}+\mathbf{a})$. Очевидно, оператор импульса $-i\hbar\nabla$ не коммутирует с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}$ (1.22). Таким образом, при движении электрона в решетке его импульс не сохраняется (не является интегралом движения в поле решеточного потенциала). Заметим, что, поскольку оператор Гамильтона $\hat{\mathcal{H}}$ (1.22) коммутирует сам с собой, закон сохранения энергии при движении электрона в решетке имеет место.

Можно показать, что следствием трансляционной инвариантности пространства кристаллической решетки является закон сохранения квазиимпульса $\mathbf{p}$ электрона.

Сохранение квазиимпульса в поле периодического потенциала решетки указывает на то, что квазиимпульс может изменяться только под действием внешних по отношению к кристаллу сил, потенциал которых не обладает периодичностью решетки:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}_{\text{внеш}}. \quad (1.23)$$

Уравнение (1.23) указывает на принципиальное отличие квазиимпульса от обычного импульса частицы, изменение которого, как нетрудно показать, определяется суммой внешних и внутренних (периодических с периодом решетки) сил.

Поскольку оператор квазиимпульса $\hat{\mathbf{p}}$ и оператор Гамильтона для электрона в кристалле (1.22) имеют одни и те же собственные функции, собственные значения $\mathbf{p}$ и ϵ этих операторов должны выражаться друг через друга. А это в свою очередь означает, что энергия электрона в кристалле является функцией квазиимпульса (а не импульса): $\epsilon=\epsilon(\mathbf{p})$.

Важным свойством квазиимпульса является то, что он в отличие от импульса свободного электрона определен неоднозначно. Это свойство квазиимпульса также является следствием трансляционной инвариантности решетки. С этим же связана периодическая зависимость энергии электрона в решетке ϵ от величины квазиимпульса. Остановимся на этом вопросе подробнее.

Рассмотрим одно из направлений основных трансляций в решетке, например направление, задаваемое вектором $\mathbf{a}_1$. Период решетки в этом направлении равен $|\mathbf{a}_1|=\mathbf{a}_1$.

Введем вектор $\mathbf{k}'$, отличающийся от $\mathbf{k}$ на величину вектора $\mathbf{g}=n_1 \frac{2\pi}{a_1} \mathbf{a}_1$, где n_1 — целое число:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \frac{2\pi}{a_1} \mathbf{a}_1 = \mathbf{k} + \mathbf{g}.$$

Произведем трансляцию волновой функции $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ на вектор $n_1 \mathbf{a}_1$. Согласно (1.18) можно записать

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1) = e^{in_1 \mathbf{k} \mathbf{a}_1} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{in_1 \left(\mathbf{k}' - n_1 \frac{2\pi}{a_1} \mathbf{a}_1 \right) \mathbf{a}_1} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

Поскольку квадрат целого числа является также целым числом, сомножитель

$$e^{-in_1^2 \frac{2\pi}{a_1^2} (a_1 \cdot a_1)} = e^{-i2\pi n_1^2} = 1,$$

откуда

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1) = e^{-in_1 \mathbf{k}' \cdot \mathbf{a}_1} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.24)$$

Выражение (1.24) показывает, что волновая функция $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ преобразуется так же, как если бы она соответствовала состоянию с квазиволновым вектором $\mathbf{k}'$. Это означает, что каждой волновой функции электрона в кристалле отвечает вся совокупность возможных квазиволновых векторов, отличающихся друг от друга на величину вектора $\mathbf{g} = n_1 \frac{2\pi}{a_1^2} \mathbf{a}_1$ с различными целыми положи-

тельными и отрицательными n_1 , а состояния, соответствующие векторам $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{g}$, физически неразличимы. Отсюда следует, что волновые функции $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ либо тождественны между собой, либо отличаются друг от друга лишь зависящим от $\mathbf{g}$ фазовым множителем $C(\mathbf{g})$, квадрат модуля которого равен единице. Рассмотрим вначале вторую возможность и найдем явный вид множителя $C(\mathbf{g})$. Изменяя вектор $\mathbf{k}$ на величины $\mathbf{g}' = n_1' \frac{2\pi}{a_1^2} \mathbf{a}_1$ и

$\mathbf{g}'' = n_1'' \frac{2\pi}{a_1^2} \mathbf{a}_1$, а затем на величину $\mathbf{g} = n_1 \frac{2\pi}{a_1^2} \mathbf{a}_1$, такую, что $\mathbf{g} = \mathbf{g}' + \mathbf{g}''$ и $n_1 = n_1' + n_1''$, можно повторить рассуждения, аналогичные тем, которые были сделаны при выводе условия (1.18), и показать, что фазовый множитель $C(\mathbf{g})$ должен иметь вид $e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}}$, откуда

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.25)$$

и согласно (1.19)

$$u_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.26)$$

Предположим теперь, что волновые функции $\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ совпадают между собой:

$$\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.27)$$

В этом случае, используя (1.19), получим

$$u_{\mathbf{k}+\mathbf{g}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{g}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.28)$$

Чтобы выяснить, какая из возможностей (1.25) или (1.27) реализуется на самом деле, найдем уравнение для функции $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и рассмотрим инвариантность уравнений для $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и (1.14) относительно преобразования $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{g}$.

Уравнение для функции $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ можно получить, подставляя волновую функцию $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ в уравнение Шредингера (1.14):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \cdot u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.29)$$

Легко заметить, что относительно такого преобразования инвариантно уравнение (1.14) для $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, в которое $\mathbf{k}$ не входит явным образом. Уравнение (1.29) не инвариантно, так как в нем имеется линейный по $\mathbf{k}$ член. Поэтому для кристалла справедливыми являются соотношения (1.27) и (1.28), которые означают, что квазиимпульс электрона определен неоднозначно, а только с точностью до вектора, кратного вектору типа $\frac{2\pi}{a_1} \mathbf{a}_1$.

Таким образом, квазиволновые векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k} \pm n_1 \frac{2\pi}{a_1} \mathbf{a}_1$, а также квазиимпульсы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p} \pm n_1 \frac{2\pi\hbar}{a_1} \mathbf{a}_1$ физически эквивалентны, т. е. соответствуют одному и тому же физическому состоянию (и, следовательно, одной и той же энергии) электрона в кристалле.

Поскольку энергия электрона — действительная величина, собственные значения ϵ для функций $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ совпадают. Но уравнение для $u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$, которое получается из (1.29) комплексным сопряжением, совпадает с уравнением для $u_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Отсюда следует, что энергия ϵ является четной функцией квазиимпульса, т. е.

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \epsilon(-\mathbf{p}), \quad (1.30)$$

и что поверхности постоянной энергии $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ в пространстве квазиимпульсов обладают центром инверсии. В частности, центром инверсии обладает поверхность Ферми $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const} = \epsilon_F$.

После того как особенности квазиимпульса электрона в кристалле выяснены, мы будем в дальнейшем для простоты называть квазиимпульс просто импульсом.

§ 7. ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

Физически различные значения проекций квазиимпульса на направление одной из основных трансляций (например, $\mathbf{a}_1$) в решетке заключены в интервале шириной $\frac{2\pi\hbar}{a_1}$. Так, векторы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_2$ на рис. 54 неэквивалентны друг другу, тогда как векторы $\mathbf{p}_1$ и $\mathbf{p}_1'$, $\mathbf{p}_2$ и $\mathbf{p}_2'$ — эквивалентны. Таким образом, энергия электрона в решетке вдоль направлений основных трансляций $\mathbf{a}_i$ ($i=1, 2, 3$) является периодической функцией квазиимпульса с периодом $\frac{2\pi\hbar}{a_i}$.

В силу условия (1.30) интервал, содержащий физически неэквивалентные значения проекций квазиимпульсов, должен располагаться симметрично относительно начала координат в простран-

стве квазиимпульсов, например для направления a_i от $-\frac{\pi\hbar}{a_i}$ до $+\frac{\pi\hbar}{a_i}$.

В случае одномерной решетки с периодом, равным a , интервал квазиимпульсов $-\frac{\pi\hbar}{a} \leq p \leq \frac{\pi\hbar}{a}$ называется первой зоной Бриллюэна. Вторая зона Бриллюэна расположена симметрично по отношению к первой зоне и по отношению к началу координат и включает в себя два интервала:

$$\text{от } -\frac{2\pi\hbar}{a} \text{ до } -\frac{\pi\hbar}{a} \text{ и от } +\frac{\pi\hbar}{a} \text{ до } +\frac{2\pi\hbar}{a};$$

третья зона Бриллюэна включает в себя интервалы:

$$\text{от } -\frac{3\pi\hbar}{a} \text{ до } -\frac{2\pi\hbar}{a} \text{ и от } +\frac{2\pi\hbar}{a} \text{ до } +\frac{3\pi\hbar}{a}$$

и т. д. (рис. 55). Суммарный интервал, соответствующий зоне Бриллюэна любого номера, всегда равен $\frac{2\pi\hbar}{a}$.

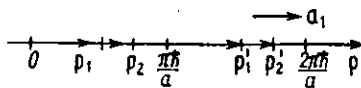


Рис. 54

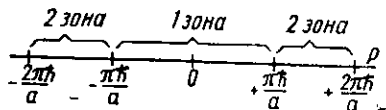


Рис. 55

Для двумерной плоской решетки с размерами кристалла L_x и L_y и с двумя основными векторами трансляций a_x и a_y компоненты квазиимпульса вдоль осей p_x и p_y могут принимать только дискретные значения из наборов

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x \text{ и } p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_y$$

(n_x, n_y — целые числа).

Физически различные значения компоненты квазиволнового вектора k_x расположены в интервале от $-\frac{\pi}{a_x}$ до $+\frac{\pi}{a_x}$, а компоненты k_y — в интервале от $-\frac{\pi}{a_y}$ до $+\frac{\pi}{a_y}$. Эти условия определяют набор векторов, проведенных из начала координат в вершины ячеек размерами $\frac{2\pi}{L_x}$ и $\frac{2\pi}{L_y}$ по осям k_x и k_y , построенных внутри прямоугольника с размерами $\frac{2\pi}{a_x}$ и $\frac{2\pi}{a_y}$. Внутри прямоугольника площадью $\frac{2\pi}{a_x} \cdot \frac{2\pi}{a_y}$ (рис. 56) расположены все физически различные квазиволновые векторы электрона для плоской прямо-

угольной решетки. Этот прямоугольник называется первой зоной Бриллюэна для такой решетки.

Аналогичное построение показывает, что первая зона Бриллюэна для простой прямоугольной трехмерной решетки с периодами основных трансляций a_x , a_y и a_z является параллелепипедом, ограниченным плоскостями (рис. 57):

$$k_x = \pm \frac{\pi}{a_x}; \quad k_y = \pm \frac{\pi}{a_y}; \quad k_z = \pm \frac{\pi}{a_z}.$$

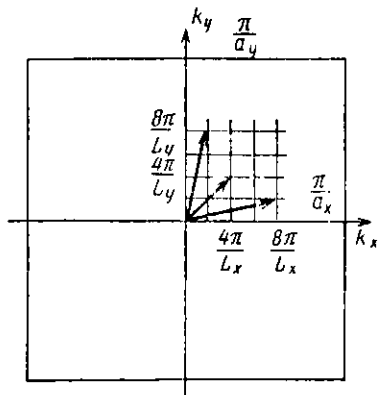


Рис. 56

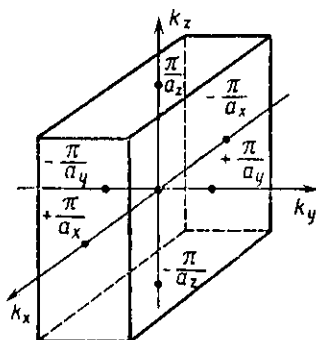


Рис. 57

В пространстве квазиимпульсов, как и в пространстве импульсов, состояния электронов распределены с постоянной плотностью $\frac{V}{(2\pi\hbar)^3}$, где V — объем кристалла. Элементарный объем в пространстве квазиимпульсов, соответствующий двум электронам с противоположно направленными спинами, составляет $\frac{(2\pi\hbar)^3}{V}$ и не зависит от формы и размеров кристалла, если в нем содержится достаточно много элементарных ячеек. Это утверждение не нуждается в строгом доказательстве и фактически следует из того, что в кристалле макроскопических размеров условия на границе практически не должны влиять на движение электронов в объеме кристалла. Чем больше кристалл, тем больше отношение его объема к поверхности и тем большая часть электронов «не чувствует» размеров и формы кристалла. Внутри достаточно большого кристалла любой формы всегда можно мысленно вырезать параллелепипед и удалить остальные части кристалла. Состояния электронов внутри параллелепипеда от этого, очевидно, не изменятся заметным образом (с точностью до доли приповерхностных электронов).

Чтобы не быть связанным с конкретным кристаллом определенного объема, все соотношения обычно записываются для кри-

сталла единичного объема ($V=1$). В этом случае на одно состояние в пространстве квазимпульсов приходится объем, равный $(2\pi\hbar)^3$.

Таким образом, если в пространстве квазимпульсов электроны занимают объем Δ , то их концентрация n в обычном пространстве равна

$$n = \frac{2\Delta}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (1.31)$$

В формуле (1.31) учтено двукратное вырождение по спину каждого электронного состояния.

Посмотрим теперь, чему соответствуют значения волновых векторов электрона, определяющие положение границ зоны Бриллюэна.

Пусть электрон с волновым вектором $\mathbf{k}$ движется в решетке в направлении вектора трансляции $\mathbf{a}_i$. Период решетки в этом направлении равен a_i . Предположим, что взаимодействие электрона с каждым отдельным ионом очень мало. Это означает, что при распространении электронной волны в периодической системе амплитуда отраженной от каждого иона волны много меньше амплитуды падающей. Однако, вследствие того что ионов в решетке очень много и отражения многочисленны, существенную роль играют фазовые соотношения между отраженными волнами.

Если длина волны λ_B де Бройля электрона превосходит расстояние между ионами, то разности фаз между волнами, отраженными от соседних ионов, малы. В этом случае взаимодействие электронной волны с решеткой в целом остается малым (порядка взаимодействия с отдельным ионом) и электрон ведет себя как квазисвободный.

При условии $n_i\lambda_B=2a_i$, где n_i — целое число, разность фаз отраженных волн будет составлять число, кратное 2π . При этом отраженные от различных ионов волны находятся в фазе друг с другом, а их амплитуды складываются. Вследствие этого даже при достаточно малой амплитуде волны, отраженной от одного иона, произойдет полное отражение электрона от решетки. Иными словами, при условии $n_i\lambda_B=2a_i$ электронная волна не может распространяться в решетке.

Условие полного отражения совпадает с известным соотношением Вульфа — Брэггов для дифракции электромагнитных волн в кристалле. Если записать его для волнового вектора электрона $|\mathbf{k}|=2\pi/\lambda_B$, то мы получим не что иное, как уравнение, определяющее границу зоны Бриллюэна в $\mathbf{k}$ -пространстве:

$$\frac{(ka_i)}{a_i} = \pm \frac{\pi}{a_i} n_i. \quad (1.32)$$

Таким образом, границы зон Бриллюэна соответствуют таким значениям волновых векторов (или импульсов) электрона, при которых электронная волна не может распространяться в решетке.

По мере приближения к границе зоны Бриллюэна (при увеличении $|k|$) бегущая электронная волна все более тормозится решеткой и для граничных значений k становится стоячей, а компонента групповой скорости волны $|v_g|_n = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \right)_n$, нормальная к границе зоны Бриллюэна, обращается в нуль. Эта особенность взаимодействия электрона с решеткой лежит в основе принципиального различия между динамикой электрона в металле и динамикой свободного электрона.

§ 8. ЭКРАНИРОВАННЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ИОНОВ РЕШЕТКИ. МЕТОД ПСЕВДОПОТЕНЦИАЛА

Прежде чем приступить к исследованию рассеяния электронов проводимости на периодическом потенциале $V(r)$ кристаллической решетки, выясним свойства этого потенциала.

Уточним постановку вопроса. Мы рассматриваем ограниченный в пространстве кристалл — периодическую структуру, образованную заряженными ионными остовами. Каждый ионный остов имеет положительный заряд $z|e|$. Периодическая структура «погружена» в отрицательно заряженную электронную жидкость, состоящую из коллективизированных валентных электронов, наличие которой, в сущности, и обеспечивает устойчивость решетки из положительно заряженных ионов. Небольшая часть коллективизированных электронов, расположенных в тонком слое вблизи поверхности Ферми $\varepsilon(p) = \varepsilon_F$, образует в возбужденном состоянии близкий к идеальному газ квазичастиц, обладающих большими (порядка нескольких электрон-вольт) энергиями и скоростями 10^8 см/с. Наличие в металле отрицательно заряженной электронной жидкости приводит к тому, что электрическое поле, создаваемое положительно заряженными ионами, является ослабленным по сравнению с кулоновским полем изолированного заряда в результате эффекта экранировки.

Теоретическое рассмотрение задачи об экранировании кулоновского потенциала ионных остовов связано с большими трудностями и требует определенных модельных представлений о характере движения электронов в кристалле.

Экранировку зарядов ионов электронами можно разделить на две части: статическую, которая осуществляется отрицательным зарядом всех валентных электронов, размазанным по всему объему кристалла, и динамическую, в которой участвуют лишь электроны на поверхности Ферми, способные изменять свою энергию и переходить из одного состояния в другие под действием переменного электрического поля.

Для определения характера изменения кулоновского потенциала иона $\phi = -\frac{z|e|}{r}$ (r — расстояние от центра иона) под влиянием статической экранировки вырожденной электронной системой обычно рассматривается следующая упрощенная модель: пренеб-

регают размерами ионов и валентные электроны заменяют отрицательно заряженным «желе» (жидкостью), заполняющим пространство между ионами.

В металле заряд любого макроскопического объема равен нулю: усредненная по объему концентрация отрицательного заряда электронов $-|e|\bar{n}$ в точности равна средней концентрации положительного заряда ионов $|e|z\frac{N}{V}$. При абсолютном нуле температуры средняя концентрация электронов $\bar{n}$ выражается через плотность состояний $\frac{\partial n}{\partial \epsilon}$ и энергию Ферми ϵ_F (см. (1.11)). Энергия Ферми ϵ_F представляет собой величину, усредненную по макроскопическому объему, содержащему достаточно много элементарных ячеек. Постоянство ϵ_F в кристалле означает, что в пределах любой макроскопической области электрическое поле в металле равно нулю. Однако в непосредственной близости от любого иона решетки полная компенсация положительного и отрицательного зарядов нарушается и возникает зависящий от координаты потенциал $\phi(r)$, который представляет собой отклонение от среднего уровня потенциала и который при $r \rightarrow 0$ должен переходить в кулоновский потенциал иона $-\frac{z|e|}{r}$ (в результате уменьшения толщины экранирующего слоя «желе») и стремиться к нулю при удалении от иона: $\phi(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$.

Зависящая от координаты r вблизи иона плотность $n(r)$ валентных электронов может быть вычислена по формуле (1.11), если в ней учесть локальное изменение энергии Ферми на величину $|e|\phi$:

$$n(r) = \int_0^{\epsilon_F + |e|\phi(r)} \frac{\partial n}{\partial \epsilon}(\epsilon) d\epsilon. \quad (1.33)$$

Потенциал $\phi(r)$, создаваемый зарядом иона $z|e|\delta(r)$ и зарядом $-|e|\Delta n(r) = -|e|(\bar{n} - n(r))$, который возникает в результате разбаланса электронного заряда при отклонении n от среднего значения $\bar{n}$ удовлетворяет уравнению Пуассона:

$$\nabla^2 \phi = -\frac{4\pi|e|\Delta n(r)}{\kappa} + 4\pi|e|z\delta(r). \quad (1.34)$$

Здесь $\delta(r)$ — плотность заряда точечного иона, $\Delta n(r)$ — плотность отрицательного заряда, возникающего при разбалансе, κ — статическая диэлектрическая проницаемость «пустой» решетки*), Δn можно записать в виде

$$\Delta n = \bar{n}(\epsilon_F) - n(\epsilon_F + |e|\phi(r)).$$

*) Диэлектрическая проницаемость «пустой» решетки определяется поляризуемостью ионных остовов решетки металла.

Поскольку при удалении от центра иона потенциал $\varphi(r)$ стремится к нулю, то существует область пространства, где справедливо неравенство $|e|\varphi(r) \ll e_F$. В этой области, разлагая $n(e_F - |e|\varphi(r))$ в ряд по малому параметру $\frac{|e|\varphi(r)}{e_F}$, получаем

$$\Delta n = -\frac{\partial n}{\partial e}(e_F)|e|\varphi(r).$$

Уравнение (1.34) при этом принимает вид

$$\nabla^2 \varphi(r) = \frac{4\pi e^2}{\kappa} \frac{\partial n}{\partial e}(e_F) \varphi(r) + 4\pi z|e|\delta(r). \quad (1.35)$$

Сферически-симметричное решение такого уравнения, удовлетворяющее условиям $\varphi(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ и $\varphi(r) \rightarrow -\frac{z|e|}{r}$ при $r \rightarrow 0$, определяет экранированный потенциал $\varphi_{\text{эк}}(r)$:

$$\varphi_{\text{эк}}(r) = -\frac{z|e|}{r} e^{-r/r_D}, \quad (1.36)$$

где

$$r_D = \left[\frac{4\pi e^2}{\kappa} \frac{\partial n}{\partial e}(e_F) \right]^{-1/2} \quad (1.37)$$

носит название дебаевского радиуса экранирования. Величина r_D определяет размер области вокруг точечного заряда в решетке, в которой эффективно проявляется кулоновское поле этого заряда. При $r > r_D$ потенциал экспоненциально убывает в результате статической экранировки электронами.

Величину r_D можно оценить, подставляя в (1.37) $\frac{\partial n}{\partial e}(e_F)$ для свободных электронов (1.10). Из выражений (1.9) и (1.10) следует, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial e}(e_F) &= \frac{(2m_0)^{3/2} e_F^{1/2}}{2\pi^2 \hbar^3} = \frac{3}{2} \frac{\bar{n}}{e_F}, \\ r_D &= \left[\frac{6\pi e^2}{\kappa} \frac{\bar{n}}{e_F} \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Для металла с $n \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$ и $e_F \sim 5 \text{ эВ}$ дебаевский радиус экранирования меньше или порядка размеров элементарной ячейки. Это означает, что в результате статической экранировки медленно убывающий с расстоянием кулоновский потенциал $\varphi = -\frac{z|e|}{r}$ изолированного иона становится короткодействующим.

Дополнительный экранирующий эффект электронов с энергией, близкой к энергии Ферми, делает кулоновский потенциал иона еще более короткодействующим и слабоосциллирующим в прост-

ранстве. Осциллирующая добавка к быстро затухающему экранированному потенциалу $\Phi_{\text{экр}}(r)$ возникает в результате того, что фермиевские электроны создают вокруг ионов неравномерное по координате r распределение плотности заряда, которое получило название фриделевских осцилляций электронной плотности.

По сути дела, фриделевские осцилляции являются следствием интерференции рассеивающихся на ионных остовах волн, связанных с движением фермиевских электронов. Электроны с энергией Ферми имеют практически постоянную скорость и поэтому образуют квазимонохроматические волны. Именно поэтому необходимым условием возникновения фриделевских осцилляций является наличие резкой ступеньки в распределении электронов по энергии. Так как количество электронов, движущихся с фермиевскими скоростями, мало по сравнению с общим количеством валентных электронов, то амплитуда фриделевских осцилляций мала по сравнению со средней величиной плотности $\bar{n}$ валентных электронов и уменьшается при увеличении размытия границы в распределении Ферми.

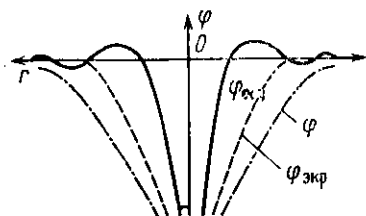


Рис. 58

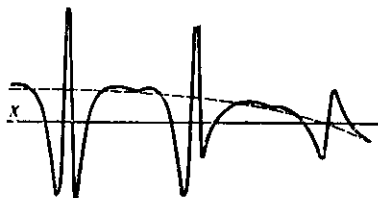


Рис. 59

Вид всех трех потенциалов $\Phi(r)$, $\Phi_{\text{экр}}(r)$ и осциллирующего $\Phi_{\text{осц}}(r)$ показан на рис. 58.

Благодаря эффекту экранирования потенциальные ямы, создаваемые ионными остовами, сильно сужаются и потенциальная энергия электрона в значительной области пространства внутри решетки практически постоянна. В области постоянного потенциала движение электрона можно рассматривать как движение свободной частицы. Волновая функция ψ электрона в этой области близка к волновой функции ψ^0 свободного электрона, которая представляет собой плоскую волну (1.1). Ситуация усложняется, когда электрон попадает в потенциальную яму вблизи иона, достаточно глубокую для того, чтобы вызывать несколько осцилляций волновой функции ψ электрона. Схематически вид реальной части волновой функции электрона в решетке изображен на рис. 59.

Обычно предполагается, что волновую функцию ψ электрона в металле можно представить как комбинацию плоской волны и быстроосциллирующих атомных волновых функций ψ_a , которые описывают связанные состояния внутри ионных остовов. При построении волновой функции электрона в решетке следует учесть,

что коллективизированные электроны не образуют связанных состояний около отдельных ионов. Чтобы удовлетворить этому условию, функция ψ должна быть ортогональна волновым функциям ψ_α связанных состояний.

Условию ортогональности удовлетворяет следующая комбинация плоской волны и функций ψ_α :

$$\psi_k(r) = \text{const} \left[e^{ikr} \sum_{\alpha'} \psi_{\alpha'}(r) \int \psi_{\alpha'}^*(r') e^{ikr'} dr' \right]. \quad (1.39)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \int \psi_{\alpha'}^*(r) \psi_k(r) dr &= \text{const} \left[\int \psi_{\alpha'}^*(r) e^{ikr} dr - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha, \alpha'} \int \psi_{\alpha'}^*(r) \psi_{\alpha}(r) dr \int \psi_{\alpha'}^*(r') e^{ikr'} dr' \right] = \\ &= \text{const} \left[\int \psi_{\alpha'}^*(r) e^{ikr} dr - \sum_{\alpha, \alpha'} \delta_{\alpha, \alpha'} \int \psi_{\alpha'}^*(r') e^{ikr'} dr' \right] = 0, \end{aligned}$$

где $\delta_{\alpha, \alpha'}$ — δ -символ Кронекера:

$$\delta_{\alpha, \alpha'} = \begin{cases} 1 & \text{при } \alpha = \alpha'; \\ 0 & \text{при } \alpha \neq \alpha'. \end{cases}$$

Функции $\psi_k(r)$ типа (1.38) называются ортогонализованными плоскими волнами (ОПВ).

ОПВ являются удобной системой функций для разложения по ним волновой функции ψ электрона в металле. Ряд разложения ψ по ОПВ-функциям достаточно быстро сходится.

Если подставить в уравнение (1.14) разложение ψ по ОПВ-функциям, то после перегруппировки членов можно получить уравнение Шредингера с некоторым новым потенциалом $V_{\text{эф}}$ для волновой функции $\tilde{\psi}$, являющейся комбинацией только плоских волн:

$$-\frac{\hbar^2}{2m'} \nabla^2 \tilde{\psi} + V_{\text{эф}} \tilde{\psi} = \epsilon \tilde{\psi}. \quad (1.40)$$

Важной особенностью уравнения (1.40) является то, что матричный элемент потенциала $|V_{\text{эф}}|$ на волновых функциях $\tilde{\psi}$ мал по сравнению с матричным элементом решеточного потенциала $|V|$ на волновых функциях электрона ψ .

Таким образом, собственные значения ϵ энергии электрона в кристалле могут быть получены путем решения уравнения (1.40), которое формально совпадает с уравнением Шредингера для электрона в поле малого периодического потенциала $V_{\text{эф}}$. Потенциал $V_{\text{эф}}$ получил название псевдопотенциала, а функция $\tilde{\psi}$ — псевдволновой функцией.

По существу же это означает, что можно найти такой достаточно слабый потенциал $V_{\text{эф}}$ (псевдопотенциал), на котором сво-

бодный электрон рассеивается так же, как на истинном потенциале $V(r)$. Поясним физический смысл этого утверждения. Двигаясь внутри иона в поле сильного притягивающего потенциала ядра, электрон ускоряется и приобретает значительную кинетическую энергию. Это в значительной степени компенсирует глубокий отрицательный потенциал иона. После выхода за пределы радиуса экранирования электрон вновь движется как свободная частица с энергией Ферми. Поэтому если не рассматривать движение внутри сердцевинки атомного остова, при входе в которую происходит резкое ускорение и при выходе из которой — резкое замедление электрона, то движение электрона в остальной части пространства решетки оказывается эквивалентным движению почти свободной частицы в поле слабого периодического потенциала.

Основными причинами слабого рассеяния электронных волн истинным потенциалом решетки является большая кинетическая энергия фермиевских электронов и значительная локализация (узость) потенциальных ям у ядер в результате экранирования. Электрон с большой энергией очень быстро проскакивает потенциальную яму, создаваемую ионом, так что она не вносит значительного возмущения в характер его движения вне ямы.

Поэтому, вместо того чтобы описывать движение электрона в решетке сложной волновой функцией, можно рассматривать движение почти свободной фермиевской квазичастицы в поле относительно слабого эффективного периодического потенциала (псевдопотенциала).

Малость эффективного потенциала $V_{\text{эф}}$ (псевдопотенциала) с точки зрения рассеяния электронов является причиной того, что разложение волновой функции ψ в ряд по ОПВ-функциям быстро сходится, так что уже одна ОПВ-функция является достаточно хорошим приближением для описания ψ .

Мы изложили метод псевдопотенциала чисто схематически и не коснулись его слабых сторон. На самом деле ситуация является гораздо более сложной. Во-первых, введение псевдопотенциала представляет собой неоднозначную операцию; окончательное же решение существенно зависит от вида выбранного псевдопотенциала. Во-вторых, сам псевдопотенциал является нелокальным интегральным оператором (он зависит не только от координаты r как периодический потенциал $V(r)$ решетки, но представляет собой функционал вида

$$\begin{aligned} V_{\text{эф}} \tilde{\psi}(r) &= V(r) \tilde{\psi}(r) + \sum_{\alpha} (\epsilon - \epsilon_{\alpha}) \psi_{\alpha}(r) \int \psi_{\alpha}^{*}(r') \tilde{\psi}(r') dr' = \\ &= V(r) \tilde{\psi}(r) + \int V_R(r, r') \tilde{\psi}(r') dr', \end{aligned} \quad (1.41)$$

где ядро интегрального оператора

$$V_R(r' \cdot r) = \sum_{\alpha} (\epsilon - \epsilon_{\alpha}) \psi_{\alpha}(r) \psi_{\alpha}^{*}(r'); \quad (1.42)$$

ϵ_{α} — собственное значение энергии атомных электронов).

В настоящее время предложено несколько наиболее удобных для вычислений и в той или иной мере обоснованных видов псевдопотенциала (псевдопотенциалы Апималу, Гейне — Абаренкова и т. д.). Различные аспекты метода псевдопотенциала подробно изложены одним из его авторов У. Харрисоном в книге «Псевдопотенциалы в теории металлов» (М.: Мир, 1968).

Введение псевдопотенциала является существенным математическим упрощением задачи, базирующимся на некоторой приближенной картине движения электронов в решетке. Нам важно здесь подчеркнуть то, что следствия, полученные из теории псевдопотенциала, хорошо согласуются с известными экспериментальными данными. Псевдопотенциал конкретного металла невозможно вычислить чисто теоретически, или, как говорят, из первых принципов. Но этого и не требуется. Теория псевдопотенциала является мощным инструментом для нахождения одних физических характеристик электронного энергетического спектра (например, уровней энергии в различных точках кристалла) при помощи других, экспериментально измеренных характеристик (например, величин перекрытия зон, энергетических щелей и т. д.). При этом вид и параметры псевдопотенциала подгоняются под имеющиеся экспериментальные данные.

Таким путем были рассчитаны основные уровни энергетического спектра электронов многих металлов и сплавов, например металлов I, II, III и IV групп периодической системы Менделеева, полуметаллов Bi, Sb, As, сплавов Bi—Sb, Pb—Sn и т. п. Вычисления с помощью метода псевдопотенциала, по существу, представляют собой некоторую интерполяционную схему для построения электронного энергетического спектра, основанную на использовании подгоночных параметров и подгоночных функций.

Глава 2

ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ МЕТАЛЛОВ

§ 1. ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНА В РЕШЕТКЕ ОТ ЕГО ИМПУЛЬСА

Малость эффективного рассеивающего потенциала в решетке чрезвычайно упрощает решение задачи о движении электрона в периодическом поле кристаллической решетки. Формально это означает, что задача о движении электрона в поле решеточного потенциала $V(\mathbf{r})$ эквивалентна задаче о движении почти свободного электрона в периодическом поле некоторого малого потенциала, которую можно решать методами теории возмущений, используя в качестве малого параметра величину $V_{\text{эф}}/e_F$.

Изменение зависимости энергии электрона от его импульса при наложении слабого периодического потенциала проще всего проследить на примере одномерной модели, когда энергия ϵ зависит только от одной компоненты импульса p .

Рассмотрим распространение электронной волны вдоль цепочки атомов с периодом a , расположенной в направлении оси x . Будем исходить из закона дисперсии для свободного электрона $\epsilon = \frac{p^2}{2m_0}$.

Достаточно слабый периодический потенциал $V_{\text{эф}}(x)$ не может существенно изменить закон дисперсии вдали от границ зон Бриллюэна. Таким образом, при малых импульсах электрон в решетке движется в первом приближении, как свободная частица с групповой скоростью $v_g = \frac{\partial \epsilon}{\partial p} = \frac{p}{m_0}$. Однако при значениях импульса p_x , приближающихся к граничным значениям $\pm \frac{\pi \hbar}{a} n$ в зоне, для которых выполняется условие Вульфа — Брэггов $n\lambda_B = 2a$, электронная волна начинает тормозиться решеткой и групповая скорость волны уменьшается по сравнению с величиной p/m_0 . Это означает, что зависимость ϵ от p в первой зоне отклоняется вниз (в сторону меньших значений ϵ) от параболической зависимости $\epsilon = p^2/2m_0$ (рис. 60), во второй зоне, вблизи границ $p_x = \pm \pi \hbar/a$, — вверх и т. д. При некоторых значениях импульса $p_x = \pm p'$ в первой зоне Бриллюэна кривая $\epsilon = \epsilon(p)$ имеет точки перегиба, в которых обращается в нуль вторая производная $\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p^2}$.

Наиболее сильное возмущение параболическая зависимость $\epsilon = \frac{p^2}{2m_0}$ претерпевает в окрестности границ зон. Поскольку при $p = \pm \frac{\pi \hbar}{a} n$ групповая скорость $v_g = \frac{\partial \epsilon}{\partial p}$ обращается в нуль, кривая $\epsilon = \epsilon(p)$ должна подходить к границам зон с нулевым наклоном касательной (рис. 60):

$$\left. \frac{\partial \epsilon}{\partial p} \right|_{p = \pm \frac{\pi \hbar}{a} n} = 0.$$

Рассмотренный характер изменения зависимости ϵ от p вблизи границ зон Бриллюэна приводит к тому, что при значениях импульса $p = \pm \frac{\pi \hbar}{a} n$ энергия испытывает разрыв и в спектре возникают энергетические щели — области запрещенных значений энергии. Какой физической картине такая ситуация соответствует?

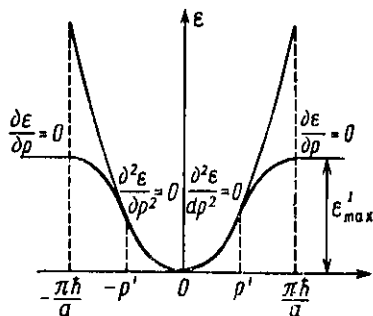


Рис. 60

Волновая функция свободного электрона $\psi_k^{(0)}(x) = Ae^{ikx}$ — бегущая волна, несущая импульс $p_x = \hbar k_x$. Бегущей волне соответствует постоянное значение плотности вероятности $|\psi_k^{(0)}(x)|^2 = A^2$ об-

наружить электрон в любой точке x в цепочке атомов, что означает, что электроны равномерно распределены в цепочке и, следовательно, плотность заряда свободных электронов — постоянная величина (напомним, что принятые циклические граничные условия позволяют не учитывать границы цепочки при рассмотрении бегущих волн).

При $k_x \rightarrow \pm \frac{\pi}{a} n$ рассеянные на периодическом потенциале $V_{\text{эф}}$ волны начинают совпадать по фазе, в результате чего даже малый рассеивающий потенциал начинает вносить сильное возмущение в движение электронов. Когда k_x становится равным $\pm \frac{\pi}{a} n$ интенсивности первичных (с вектором k_x) и рассеянных (с вектором $-k_x$) волны сравниваются и образуются стоячие волны. Из бегущих волн $Ae^{i n \frac{\pi}{a} x}$ и $Ae^{-i n \frac{\pi}{a} x}$ можно сформировать только две стоячие волны $A(e^{i n \frac{\pi}{a} x} + e^{-i n \frac{\pi}{a} x})$ и $A(e^{i n \frac{\pi}{a} x} - e^{-i n \frac{\pi}{a} x})$, которым соответствуют волновые функции

$$\psi_1(x) = 2A \cos \frac{\pi}{a} nx, \quad \psi_2(x) = 2Ai \sin \frac{\pi}{a} nx. \quad (2.1)$$

Волновым функциям ψ_1 и ψ_2 отвечает периодическое вдоль цепочки распределение электронной плотности

$$|\psi_1|^2 = 4A^2 \cos^2 \frac{\pi}{a} nx \quad \text{и} \quad |\psi_2|^2 = 4A^2 \sin^2 \frac{\pi}{a} nx.$$

Поскольку начало отсчета x совпадает с положением одного из ионов цепочки, в стоячей волне ψ_1 максимумы плотности электронных состояний с амплитудой $4A^2$ совпадают с положениями центров ионов (где потенциальная энергия электронов имеет наименьшее значение); а в волне ψ_2 максимумы электронной плотности расположены в середине между соседними ионами (где потенциальная энергия электронов максимальна). Вследствие этого средняя потенциальная энергия в состоянии ψ_1 всегда меньше, чем уровень энергии, соответствующий бегущей волне с тем же самым квазимпульсом $\frac{\pi \hbar}{a} n$, а в состоянии ψ_2 — больше. Отличие значений энергии в состояниях ψ_1 и ψ_2 и определяет величину разрыва энергии на границах зон Бриллюэна.

Для расчета собственных значений энергии электрона в области, достаточно удаленной от границы, где отклонение кривой $\epsilon(p)$ от параболы невелико, можно использовать теорию возмущений. В качестве нулевого приближения при этом может быть взята волновая функция свободного электрона $\psi_k^{(0)}(x) = Ae^{ikx}$. Определим множитель A :

$$\int_0^L \psi_k^{(0)*}(x) \psi_k^{(0)}(x) dx = A^2 \int_0^L dx = 1,$$

где L — длина «кристалла» в выбранной одномерной модели. Таким образом, $A=1/\sqrt{L}$ и волновая функция нулевого приближения имеет вид

$$\psi_k^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}. \quad (2.2)$$

Гамильтониан $\hat{\mathcal{H}}^0$ в нулевом приближении представляет собой оператор кинетической энергии $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2}$, которому соответствуют собственные значения энергии

$$\varepsilon^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{p^2}{2m_0}.$$

Напомним, что спектр энергии $\varepsilon^{(0)}(p)$ квазинепрерывен, поскольку импульс принимает дискретный ряд значений $p_n = \frac{2\pi\hbar}{L} n$, где $n = \pm 1, \pm 2, \dots, +N/2$, N — полное число электронов.

Определим поправки к собственным значениям энергии к собственным функциям в виде следующих разложений:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k) &= \varepsilon^{(0)}(k) + \varepsilon^{(1)}(k) + \varepsilon^{(2)}(k) + \dots, \\ \psi_k(x) &= \psi_k^{(0)}(x) + \psi_k^{(1)}(x) + \psi_k^{(2)}(x) + \dots \end{aligned} \quad (2.3)$$

Согласно теории возмущений для нахождения поправок необходимо вычислить матричные элементы псевдопотенциала $V_{\text{эф}}(x)$ на функциях $\psi_k^{(0)}(x)$:

$$(V_{\text{эф}})_{k',k} = \int_0^L \psi_{k'}^{(0)*}(x) V_{\text{эф}}(x) \psi_k^{(0)}(x) dx. \quad (2.4)$$

Покажем, что матричные элементы $(V_{\text{эф}})_{k',k}$ отличны от нуля только при определенных значениях k' и k . Для этого разложим псевдопотенциал в ряд Фурье по гармоникам $\exp\left(i \frac{2\pi}{a} nx\right)$ с постоянными коэффициентами C_n :

$$V_{\text{эф}}(x) = \sum_n C_n e^{i \frac{2\pi}{a} nx} \quad (2.5)$$

(это можно сделать, поскольку псевдопотенциал является периодической функцией x с периодом a).

Подставим ряд (2.5) в выражение (2.4):

$$(V_{\text{эф}})_{k',k} = \frac{1}{L} \int_0^L e^{ik'x} \sum_n C_n e^{i \frac{2\pi}{a} nx} e^{ikx} dx =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{L} \sum_n C_n \int_0^L e^{i \left(k + \frac{2\pi}{a} n - k' \right) x} dx = \\
&= \sum_n C_n \delta_{k', k + \frac{2\pi}{a} n} = \begin{cases} 0 & \text{при } k' \neq k + \frac{2\pi}{a} n, \\ C_{n'} & \text{при } k' = k + \frac{2\pi}{a} n. \end{cases} \quad (2.6)
\end{aligned}$$

Таким образом, матричные элементы $(V_{\text{эф}})_{k', k}$ равны нулю при любых значениях $k' \neq k + \frac{2\pi}{a} n$, кроме тех, при которых $k' = k + \frac{2\pi}{a} n$. В этом случае матричный элемент равен соответствующему коэффициенту $C_{n'}$ в ряду Фурье (2.5). Поправка $\varepsilon^{(1)}(k)$ к энергии в первом приближении совпадает с диагональным матричным элементом

$$\varepsilon^{(1)}(k) = (V_{\text{эф}})_{k, k} = \frac{1}{L} \int_0^L V_{\text{эф}}(x) dx = \bar{V}_{\text{эф}} \quad (2.7)$$

и равна усредненному по кристаллу значению псевдопотенциала. Эта поправка не зависит от волнового вектора k .

Таким образом, в первом приближении энергия электронов изменяется на постоянную величину $\bar{V}_{\text{эф}}$, которая добавляется к энергии нулевого приближения $\varepsilon^{(0)}(k)$. Это изменение несущественно, поскольку сдвиг всех уровней энергии на одну и ту же величину может быть учтен путем переноса начала отсчета.

Согласно теории возмущений поправка к энергии во втором приближении $\varepsilon^{(2)}(k)$ может быть записана в виде

$$\varepsilon^{(2)}(k) = \sum_{k'} \frac{|(V_{\text{эф}})_{k', k}|^2}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}(k')} = \sum_n \frac{|C_n|^2}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a} n\right)}. \quad (2.8)$$

Применение теории возмущений возможно только тогда, когда матричные элементы псевдопотенциала малы по сравнению с энергией электрона $\varepsilon^{(0)}(k)$ в нулевом приближении. Поправка $\varepsilon^{(2)}(k)$ имеет второй порядок малости по параметру $|V_{\text{эф}}|/\varepsilon^{(0)}$, если разность уровней энергии $\varepsilon^{(0)}(k)$ и $\varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a} n\right)$ одного порядка с величиной $\varepsilon^{(0)}(k)$. При этом же условии волновая функция электрона с точностью до первого порядка теории возмущений имеет вид

$$\psi_k(x) = \psi_k^{(0)}(x) + \sum_n \frac{C_n}{\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a} n\right)} \psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a} n\right)}^{(0)}(x). \quad (2.9)$$

Вычисление поправок по теории возмущения перестает быть корректным для тех уровней энергии, для которых разность $\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$ мала и сравнима с $|C_n|$. Нетрудно заметить, что эти состояния соответствуют волновым векторам, близким к границам зон Бриллюэна. Действительно, положим $\varepsilon^{(0)}(k) = \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$. Это равенство означает, что $\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \times \left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)^2$, откуда $k^2 = k^2 + \frac{4\pi}{a}nk + \frac{4\pi^2 n^2}{a^2}$ или $k = -\frac{\pi}{a}n$, где $n = \pm 1, \pm 2, \dots$. Таким образом, совпадение уровней энергии $\varepsilon^{(0)}(k)$ и $\varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$ имеет место, если волновой вектор лежит на границе одной из зон Бриллюэна. При этом поправки к энергии и волновой функции становятся аномально большими. Иными словами вблизи границы зоны Бриллюэна квазисвободное движение электрона претерпевает сильное возмущение.

Как следует из выражения (2.9), при уменьшении знаменателя $\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$ возрастает коэффициент при волновой функции $\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x)$. Это означает, что состояние $\psi_k(x)$ при $k \rightarrow -\frac{\pi}{a}n$ становится смешанным, причем доля состояния $\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x)$ в нем по порядку величины сравнивается с долей состояния $\psi_k^{(0)}(x)$. На границе зоны Бриллюэна $k = -\frac{\pi}{a}n$ при точном равенстве энергий $\varepsilon^{(0)}(k) = \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$ уровень энергии $\varepsilon^{(0)}(k)$ становится вырожденным, так как ему соответствуют две различные волновые функции $\psi_k^{(0)}(x)$ и $\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x)$. Следовательно, вблизи границ зоны Бриллюэна уже в нулевом приближении теории возмущений необходимо учитывать вырождение и волновая функция нулевого приближения $\psi^{(0)}(x)$ должна иметь смешанный вид

$$\psi^{(0)}(x) = a\psi_k^{(0)}(x) + b\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x), \quad (2.10)$$

где a, b — неизвестные коэффициенты.

При отсутствии вырождения $b \ll a$; для вырожденных состояний a и b — величины одного порядка.

Подставим волновую функцию (2.10) в уравнение Шредингера для возмущенной системы

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{эф}}(x)\right) \psi = \varepsilon \psi \quad (2.11)$$

и учтем, что $\psi_k^{(0)}(x)$ и $\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x)$ являются решениями этого уравнения при $V_{\text{эф}}(x)=0$:

$$a\varepsilon^{(0)}(k)\psi_k^{(0)}(x) + b\varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)\psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x) + V_{\text{эф}}(x)\psi^{(0)}(x) = \varepsilon\psi^{(0)}(x). \quad (2.12)$$

Для удобства обозначим

$$\begin{aligned} \psi_k^{(0)}(x) &= \psi_1; \quad \psi_{\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}^{(0)}(x) = \psi_2; \\ \varepsilon^{(0)}(k) &= \varepsilon_1; \quad \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right) = \varepsilon_2. \end{aligned}$$

Уравнение (2.12) примет вид

$$a\varepsilon_1\psi_1 + b\varepsilon_2\psi_2 + V_{\text{эф}}(a\psi_1 + b\psi_2) = \varepsilon(a\psi_1 + b\psi_2).$$

Умножая его слева на ψ_1^* и ψ_2^* соответственно и интегрируя по x , получим

$$\begin{aligned} a\varepsilon_1 + a(V_{\text{эф}})_{11} + b(V_{\text{эф}})_{12} &= \varepsilon a, \\ a\varepsilon_2 + a(V_{\text{эф}})_{21} + b(V_{\text{эф}})_{22} &= \varepsilon b, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} [\varepsilon_1 + (V_{\text{эф}})_{11} - \varepsilon]a + (V_{\text{эф}})_{12}b &= 0, \\ (V_{\text{эф}})_{21}a + [\varepsilon_2 + (V_{\text{эф}})_{22} - \varepsilon]b &= 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $(V_{\text{эф}})_{ij}$ — матричные элементы эффективного потенциала на функциях ψ_i, ψ_j ($i, j=1, 2$).

Система линейных однородных уравнений (2.13) относительно a и b имеет нетривиальное решение только в том случае, если детерминант системы обращается в нуль:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 + (V_{\text{эф}})_{11} - \varepsilon & (V_{\text{эф}})_{12} \\ (V_{\text{эф}})_{21} & \varepsilon_2 + (V_{\text{эф}})_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0. \quad (2.14)$$

Это в свою очередь дает уравнение для определения энергии. Учитывая, что

$$[(V_{\text{эф}})_{11} = (V_{\text{эф}})_{22} = \bar{V}_{\text{эф}}$$

и

$$(V_{\text{эф}})_{12}(V_{\text{эф}})_{21} = |C_n|^2 = \left| \frac{1}{L} \int_0^L V_{\text{эф}}(x) e^{-i \frac{2\pi}{a} nx} dx \right|^2 = |(V_{\text{эф}})|_n^2,$$

получим

$$\varepsilon = \bar{V}_{\text{эф}} + \frac{\varepsilon^{(0)}(k) + \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)}{2} \pm \sqrt{\frac{\left[\varepsilon^{(0)}(k) - \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)\right]^2}{4} + |(V_{\text{эф}})|_n^2} \quad (2.15)$$

Из выражения (2.15) следует, что при конечном псевдопотенциале энергия электрона терпит разрыв в точке, где $\varepsilon^{(0)}(k) = \varepsilon^{(0)}\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right)$, т. е. на границе зоны Бриллюэна. При подходе к границе $k = -\frac{\pi}{a}n$ слева и справа энергия стремится к соответствующим величинам:

$$\varepsilon^{(0)}\left(\frac{2\pi}{a}n\right) - |(V_{\text{эф}})|_n \text{ и } \varepsilon^{(0)}\left(\frac{2\pi}{a}n\right) + |(V_{\text{эф}})|_n.$$

Таким образом, величина разрыва энергии равна $2|(V_{\text{эф}})|_n$ и обращается в нуль только при $V_{\text{эф}}(x) = 0$. Разрывы энергии на границе зон Бриллюэна эквивалентны тому, что в энергетическом спектре электрона в металле имеются запрещенные состояния (и соответствующие им запрещенные значения энергии). Интервал запрещенных значений энергии совпадает с величиной разрыва $2|(V_{\text{эф}})|_n$.

Чтобы проиллюстрировать характер зависимости величины разрыва энергии от номера n зоны Бриллюэна, воспользуемся простой моделью эффективного потенциала $V_{\text{эф}}(x)$ в виде периодически повторяющихся прямоугольных ям глубиной V_0 и шириной $2b$ (модель Кронига — Пенни) (рис. 61).

Для такой модели

$$|(V_{\text{эф}})|_n = \left| \frac{1}{L} \int_0^L V_{\text{эф}}(x) e^{-i \frac{2\pi}{a} nx} dx \right| = \left| \frac{V_0}{\pi n} \sin \frac{2\pi n b}{a} \right|. \quad (2.16)$$

Как уже отмечалось в § 7 гл. 1, значения импульса в 1-, 2-й и т. д. зонах Бриллюэна являются физически эквивалентными. Но физически эквивалентным значениям импульса должны соответствовать одни и те же значения энергии. Чтобы удовлетворить этому требованию, произведем трансляцию (сдвиг) эквивалентных

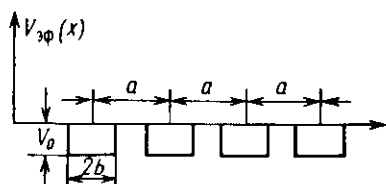


Рис. 61

половинок зон (интервалов $0 \div \frac{\pi\hbar}{a}$, $\frac{\pi\hbar}{a} \div \frac{2\pi\hbar}{a}$ и т. п.) и соответствующих им участков кривой $\varepsilon(p)$ с периодом $\frac{2\pi\hbar}{a}$.

В результате такой трансляции картина, изображенная на рис. 62, перейдет в картину, показанную на рис. 63. При этом энергия становится периодической (с периодом $\frac{2\pi\hbar}{a}$) и многозначной функцией импульса. В энергетическом спектре образуют-

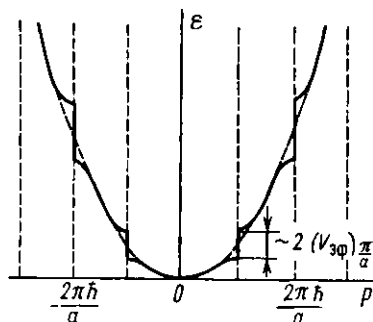


Рис. 62

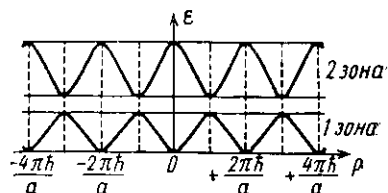


Рис. 63

ся полосы разрешенных значений энергии — так называемые энергетические зоны (1-я, 2-я, 3-я и т. д.), разделенные интервалами запрещенных значений энергии. Однозначность зависимости энергии от импульса сохраняется лишь в пределах каждой энергетической зоны.

То, что было проделано выше с зависимостью энергии от импульса, следует рассматривать как метод перехода от непрерывного энергетического спектра свободного электрона к «полосатому» энергетическому спектру электрона в слабом периодическом поле эффективного потенциала. При этом важно обратить внимание на следующее. Если рассматривать зоны Бриллюэна с точки зрения возможных значений импульса, то можно ограничиться 1-й зоной, так как в этом смысле все зоны эквивалентны и 1-я зона содержит в себе все физически различные значения импульсов.

Однако, для того чтобы построить энергетические зоны (рис. 63), необходимо было рассмотреть несколько зон Бриллюэна. Зависимость $\varepsilon(p)$ в 1-й зоне Бриллюэна привела путем трансляции к построению первой энергетической зоны. Та же зависимость во 2-й зоне Бриллюэна позволила построить вторую энергетическую зону и т. д.

Полученная картина зонного спектра существенно усложняется в случае двух или трех измерений. Это связано с тем, что расстояния до границ зон Бриллюэна становятся зависящими от направления импульса, а следовательно, и связь между энергией и

импульсом становится различной для разных направлений в решетке.

Тем не менее общая идея рассмотренного выше метода построения энергетического спектра для одномерной цепочки может быть использована при построении энергетического спектра трехмерных кристаллов (см. § 4, 5 гл. 2).

Границы зон Бриллюэна для двумерного или трехмерного кристалла являются соответственно теми прямыми или плоскостями в r -пространстве, на которых энергия электрона терпит разрыв. Интерференция между падающей и отраженной от атомных плоскостей электронными волнами приводит к тому, что в направлениях, перпендикулярных атомным плоскостям при граничных значениях импульса, возникают стоячие волны. Бегущие волны могут распространяться только вдоль атомных плоскостей.

Вследствие этого на границах зон обращается в нуль нормальная составляющая скорости электрона $(v_g)_n = \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial p} \right)_n$. Это приводит к тому, что энергетические поверхности $\epsilon(p) = \text{const}$ не могут касаться границ зон Бриллюэна и должны их пересекать в направлении нормали к границе. Иными словами, нормаль к изоэнергетической поверхности $\epsilon(p) = \text{const}$, совпадающая по направлению со скоростью электрона $v_g = \text{grad}_p \epsilon$, на границе зон Бриллюэна должна быть расположена в плоскости границы.

§ 2. ПОСТРОЕНИЕ ЗОН БРИЛЛЮЭНА

В § 7 гл. 1 были построены зоны Бриллюэна для одномерной цепочки, а также первая зона Бриллюэна для плоской квадратной и простой кубической решеток. Было установлено, что границы зон Бриллюэна определяют значения импульсов, при которых электронные волны отражаются решеткой и энергия электрона испытывает разрыв. Поэтому, чтобы построить 1-, 2-, 3-ю и т. д. зоны, необходимо прежде всего найти в импульсном пространстве все возможные семейства плоскостей, на которых энергия испытывает разрыв. При построении таких плоскостей удобно поступить следующим образом: рассматривать последовательно семейства эквидистантных плоскостей, образованных атомами кристалла, начиная с семейств, соседние плоскости которых наиболее удалены друг от друга, и переходя к семействам со все более коротким периодом a_i (расстоянием между соседними плоскостями семейства).

Для каждого семейства в реальной решетке (в r -пространстве) рассматривается плоская волна, распространяющаяся по направлению перпендикуляра $a_i/|a_i|$ к плоскостям семейства. Значения волновых векторов k_n в этом направлении, которые определяют в r -пространстве положение плоскостей разрыва энергии (отражающие плоскости), находятся из условия Вульфа — Брэггов:

$$n\lambda_n = 2a_i, \quad \text{где } n = 1, 2, 3, \dots,$$

откуда

$$k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \pm \frac{\pi}{a_i} n \text{ и } p_n = \pm \frac{\pi \hbar}{a_i} n.$$

Таким образом, каждому семейству эквидистантных плоскостей в кристалле соответствует семейство параллельных ему отражающих плоскостей в $\mathbf{p}$ -пространстве, которые задаются значениями импульсов $p_n = \pm \frac{\pi \hbar}{a_i} n$ в направлении единичного вектора $\mathbf{a}_i/|\mathbf{a}_i|$.

Для демонстрации метода построения плоскостей разрыва энергии, изложенного выше, и конструирования из них границ зон рассмотрим двумерный кристалл с плоской квадратной решеткой, имеющей период a (рис. 64).

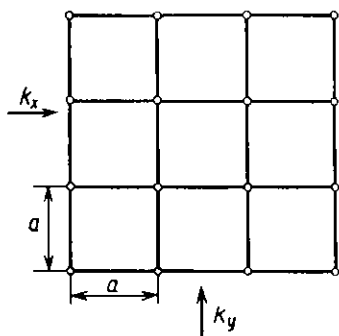


Рис. 64

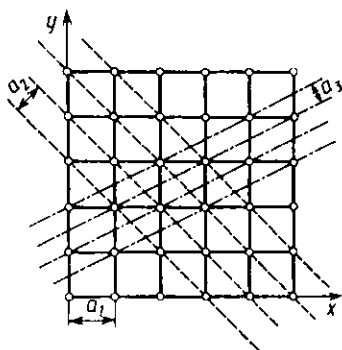


Рис. 65

Рассмотрим вначале семейства эквидистантных линий, расположенных на максимальном расстоянии друг от друга. Таких семейств два: одно состоит из линий, перпендикулярных оси x (расстояние между ними $a_1=a$); другое образовано линиями, перпендикулярными оси y (сплошные линии на рис. 65). Легко убедиться, что других семейств с периодом a не существует. Затем следуют два семейства линий, расположенных на расстояниях $a_2=a/\sqrt{2}$ друг от друга (диагональные пунктирные линии на рис. 65). Далее идут четыре эквивалентных семейства прямых. Одно из этих семейств изображено на рис. 65 штрихпунктирными линиями. Образующие его прямые проходят на расстояниях $a_3=a/\sqrt{5}$ друг от друга.

Рассмотрим одно из построенных семейств, в котором эквидистантные линии проходят на расстояниях a_i друг от друга (рис. 66). Пусть электрон с волновым вектором $\mathbf{k}_i$ движется перпендикулярно линиям этого семейства. При значениях вектора

$k_i = \pm \frac{\pi}{a_i} n$ энергия испытывает разрыв. Эти значения волнового вектора определяют в данном направлении положения границ зон Бриллюэна.

Выберем в k -пространстве начало координат и проведем через него линию, параллельную вектору k_i . Отметим точки $\pm \frac{\pi}{a} n$ на этой линии и проведем через них перпендикулярные прямые (рис. 67). Эти прямые и будут линиями, на которых энергия испытывает разрывы. [У всех векторов, проведенных из начала координат в k -пространстве в любую точку на этих линиях, их проекция на выбранное направление k_i равняется $\pm \frac{\pi}{a} n$. Следова-

тельно, составляющая скорости движения электрона вдоль направления k_i обращается в нуль и электронная волна отражается решеткой.] Чем больше расстояние a_i между эквидистантными линиями, тем ближе к началу координат в k -пространстве расположены линии разрыва энергии. Так как первой зоной Бриллюэна называется площадь (в трехмерном случае — объем) в k -пространстве, ограниченная

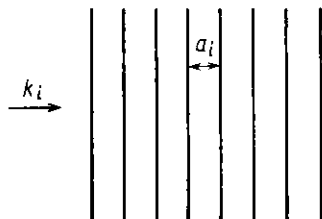


Рис. 66

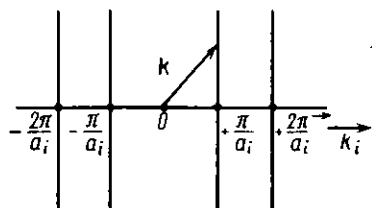


Рис. 67

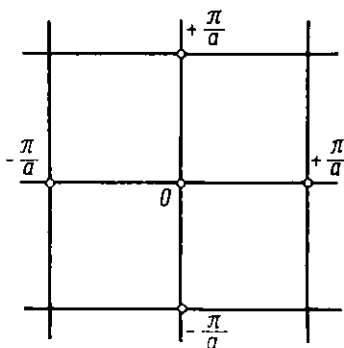


Рис. 68

совокупностью прямых (плоскостей) разрыва энергии, наиболее близко расположенных к началу координат, то для ее построения нужно прежде всего рассматривать семейства эквидистантных прямых в исходной решетке, расположенных друг от друга на наибольшем расстоянии.

Таким образом, построение первой зоны Бриллюэна для решетки, показанной на рис. 64, необходимо начать, используя два

взаимно перпендикулярных семейства линий с максимальным расстоянием между ними, равным периоду решетки a . Рассмотрим волновые векторы электрона, ортогональные каждому из семейств (на рис. 64 это векторы k_x и k_y).

Через начало координат в k -пространстве проводим прямые, параллельные векторам k_x и k_y . Перпендикулярно этим прямым проводим линии через точки, соответствующие значениям волнового вектора $k_i = \pm \frac{\pi}{a} n$, где $n = 1, 2, 3, \dots$. Отметим, что эти линии параллельны выбранным семействам эквидистантных линий в решетке кристалла, но расстояние между ними обратно пропорционально a (рис. 68).

Следующие два семейства эквидистантных линий с периодом, равным $a/\sqrt{2}$ (диагональные семейства на рис. 65 и 69), дадут линии разрыва энергии в k -пространстве, расположенные под углом 45° к построенным выше и проходящие на расстояниях $\pm \frac{\sqrt{2}}{a} \pi$ от начала координат (рис. 70).

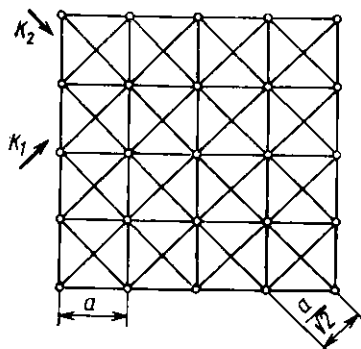


Рис. 69

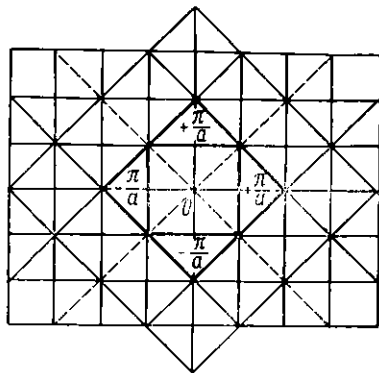


Рис. 70

Аналогично строится совокупность линий разрыва энергии, соответствующих четырем семействам эквидистантных линий, имеющих период $a/\sqrt{5}$ и т. д.

Продолжая построение далее, можно нанести в k -пространстве все возможные линии разрыва энергии, все более и более удаленные от начала координат по мере уменьшения периода порождающих их семейств эквидистантных линий. Однако, как станет ясно из дальнейшего, построение большого числа различных семейств линий разрыва энергии не имеет практического смысла.

Приступим теперь к конструированию зон Бриллюэна. Как было указано, первая зона Бриллюэна представляет собой площадь, ограниченную совокупностью линий разрыва энергии, наиболее близко расположенных к началу координат. Вторая зона

Бриллюэна есть совокупность площадей, прилегающих к границам первой зоны и равных по площади первой зоне. Аналогично третья зона состоит из площадей, прилегающих к границам второй зоны, равных по площади второй зоне, и т. д.

Первые четыре зоны Бриллюэна для двумерной квадратной решетки показаны на рис. 71. Косой штриховкой под углом 45° к осям обозначена первая зона, вертикальной штриховкой — вторая зона, горизонтальной — третья зона, четвертая оставлена незаштрихованной. Зоны становятся многосвязными начиная со второй.

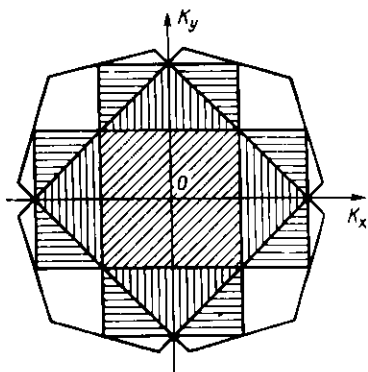


Рис. 71

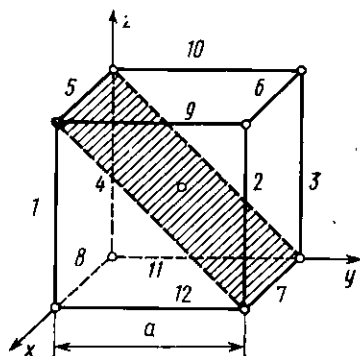


Рис. 72

Принцип построения зон Бриллюэна в трехмерном случае аналогичен описанному и сводится к нахождению совокупности плоскостей разрыва энергии в k -пространстве и к классификации (по зонам) областей, ограниченных этими плоскостями.

Для примера проведем построение 1-й зоны Бриллюэна для объемно-центрированной кубической решетки (такую решетку имеют щелочные металлы при комнатной температуре (см. рис. 3)). С этой целью найдем вначале семейства эквидистантных плоскостей, расположенных на наибольшем удалении друг от друга. Такие семейства образуются диагональными плоскостями, одна из которых показана рис. 72. Расстояния между этими плоскостями равны $a/\sqrt{2}$. Эквивалентных семейств такого типа будет шесть (вдвое меньше, чем число ребер у куба). Поверхности одного из шести таких семейств параллельны плоскости, проходящей через ребра 5 и 7 куба (рис. 72). Плоскости второго семейства параллельны плоскости, проходящей через ребра 6 и 8, третьего — плоскости, проходящей через ребра 10 и 12, и т. д.

Проведем через начало координат в k -пространстве прямые в направлении волновых векторов, перпендикулярных каждому из шести семейств эквидистантных плоскостей. На расстоянии $\sqrt{2}\pi/a$ от начала координат построим плоскости, перпендикулярные ука-

занным прямым (каждая пара этих плоскостей параллельна одному из семейств эквидистантных плоскостей, иными словами, каждое семейство эквидистантных плоскостей с периодом $a/\sqrt{2}$ порождает в k -пространстве параллельные им плоскости разрыва энергии, проходящие на расстоянии $2\sqrt{2}\pi/a$ друг от друга).

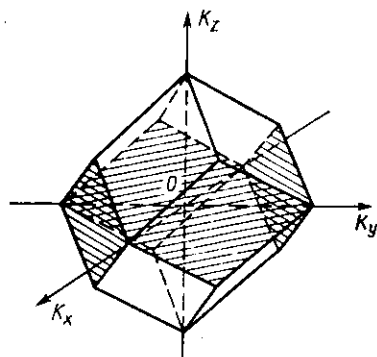


Рис. 73

Пересечение двенадцати таких плоскостей ограничивает объем первой зоны Бриллюэна, которая представляет собой ромбический додекаэдр (рис. 73). Два семейства диагональных плоскостей, перпендикулярных плоскости xy (на рис. 73 это семейства, проходящие через ребра 1—3 и 2—4 на рис. 72), порождают четыре грани, выделенные на рис. 73 штриховкой. Четыре остальных семейства плоскостей, расположенных под углом 45° к плоскости xy , порождают восемь незаштрихованных граней. Каждому семейству соответствуют две плоскости разрыва энергии, расположенные

симметрично относительно начала координат. Центры всех граней ромбического додекаэдра первой зоны расположены на одинаковом расстоянии от начала координат, равном $\sqrt{2}\pi/a$.

Построим первую зону Бриллюэна для гранецентрированной кубической решетки (см. рис. 4). Подобную решетку имеют, например, золото, серебро, медь. В этом случае семейства эквидистантных плоскостей, проходящих на максимальном удалении друг от друга, образуются плоскостями, расположенными на расстояниях $a/\sqrt{3}$ (две такие плоскости выделены штриховкой на рис. 74). Каждая из таких плоскостей содержит в себе диагонали трех граней куба, имеющих одну общую вершину. Семейств с периодом $a/\sqrt{3}$ четыре. В пространстве волновых векторов они дадут восемь плоскостей разрыва энергии, отстоящих на $\sqrt{3}\pi/a$ от начала координат. Вторая группа семейств эквидистантных плоскостей имеет период $a/2$ ($a/2 < a/\sqrt{3}$) и состоит из граней куба и параллельных им плоскостей, проходящих через центральные атомы граней. Эти семейства в k -пространстве дадут шесть плоскостей, перпендикулярных осям k_x , k_y , k_z и отстоящих от начала координат на расстоянии $2\pi/a$.

Восемь плоскостей первого типа (с периодом $2\sqrt{3}\pi/a$) и шесть плоскостей второго (с периодом $4\pi/a$), пересекаясь между собой, ограничивают объем первой зоны Бриллюэна для кубической гранецентрированной решетки, которая представляет собой кубооктаэдр (рис. 75). Выбирая семейства эквидистантных плоскостей с периодом, меньшим $a/2$, и строя соответствующие им поверхно-

сти разрыва энергии в k -пространстве, можно сконструировать примыкающую к первой вторую зону и т. д.

Как и в двумерном случае, все зоны начиная со второй становятся многосвязными. Однако сумма всех объемов, относящихся к каждой зоне, постоянна и равна объему первой зоны.

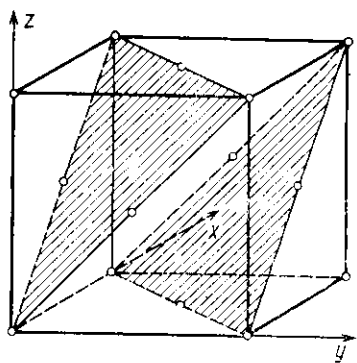


Рис. 74

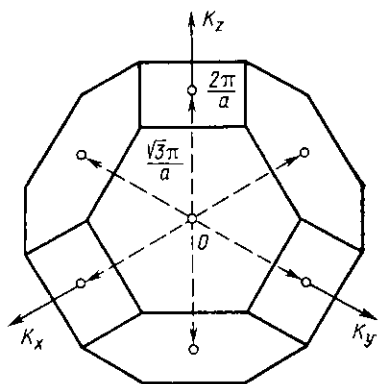


Рис. 75

В заключение этого раздела проведем построение первой зоны Бриллюэна для гексагональной плотноупакованной решетки (см. рис. 5). Напомним, что ГПУ-решетка характеризуется отношением c/a , равным $\sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1,633$ (см. § 2 гл. 1).

Многие двухвалентные металлы (бериллий, магний, цинк, кадмий), а также некоторые трехвалентные (иттрий, таллий) обладают гексагональной кристаллической структурой. Решетки этих металлов имеют отношение c/a , близкое к значению для ГПУ-решетки. Так, например, у таллия при температуре жидкого гелия $c/a=1,593$. Таким образом, идеальная ГПУ-решетка является достаточно хорошей моделью кристаллической структуры указанных металлов.

Рассмотрим геометрию ГПУ-решетки. Ось симметрии наиболее высокого порядка, совпадающая с продольной осью любой из гексагональных призм в ГПУ-решетке (см. рис. 5), обозначается обычно c_3 . Плоскости, перпендикулярные этой оси, носят название базисных. Базисные эквидистантные плоскости расположены на расстояниях s друг от друга. Эти плоскости порождают в k -пространстве плоскости разрыва энергии, ортогональные волновому вектору k_c , направленному вдоль оси c_3 . Семейство таких плоскостей разрыва энергии имеет период $4\pi/c$. Две плоскости семейства, ближайшие к началу координат в k -пространстве, ограничивают 1-ю зону Бриллюэна в направлении вектора k_c .

Для построения границ 1-й зоны Бриллюэна в направлениях, перпендикулярных k_c , рассмотрим одну из эквидистантных плос-

костей, параллельных базисной плоскости (рис. 76). Здесь черными кружками показаны атомы, расположенные непосредственно на данной плоскости, а пустыми кружками — проекции на эту плоскость атомов, расположенных на соседних базисных плоскостях, смещенных на расстояния $\pm c/2$ вдоль оси c_3 . На рис. 76 выделен один из шестиугольников в базисной плоскости, в вершинах и в центре которого находятся атомы решетки, обозначенные черными кружками.

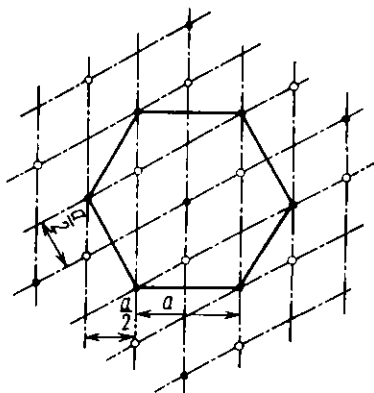


Рис. 76

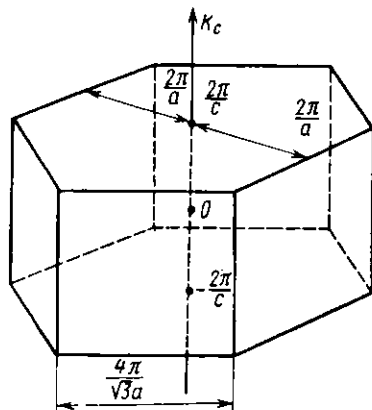


Рис. 77

Рассмотрим различные семейства эквидистантных плоскостей, параллельных оси c_3 . Среди них имеется шесть семейств с максимальным периодом $a/2$. Каждое из этих семейств переходит в любое из пяти остальных при повороте вокруг оси c_3 на угол $\pm \left(\frac{2\pi}{6}\right) \cdot n$, где $n=1, 2, \dots, 5$. Период семейства равен $a/2$. На рис. 76 штрихпунктиром показаны линии пересечения с базисной плоскостью двух из указанных семейств, расположенных под углом 60° друг к другу.

В пространстве волновых векторов каждое семейство с периодом $a/2$ порождает плоскости разрыва энергии, расположенные на расстояниях $4\pi/a$. Шесть таких плоскостей, симметричных относительно оси k_c и ближайших к началу координат в k -пространстве, совместно с двумя ближайшими плоскостями, перпендикулярными k_c , образуют гексагональную призму (рис. 77). Ребра правильного шестиугольника в основании призмы равны $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$, высота призмы $-\frac{4\pi}{c}$.

Рассматривая все возможные семейства эквидистантных плоскостей, идущих под различными углами к оси c_3 (не равными 0 или 90°), нетрудно убедиться, что не существует каких-либо плос-

костей разрыва энергии в k -пространстве, пересекающих построенную гексагональную призму. Таким образом, ее поверхность состоит из плоскостей разрыва энергии, ближайших к началу координат, а сама гексагональная призма представляет собой 1-ю зону Бриллюэна для ГПУ-решетки. Отношение высоты призмы $\frac{4\pi}{c}$ к стороне основания $\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ составляет $\sqrt{3} \frac{a}{c} \simeq 1,06$.

Заметим, что гексагональная призма первой зоны Бриллюэна повернута на угол $\pm 30^\circ$ вокруг оси k_z по отношению к исходной гексагональной призме в кристаллической решетке.

§ 3. ОБРАТНАЯ РЕШЕТКА. МЕТОД ВИГНЕРА — ЗЕЙТЦА ПОСТРОЕНИЯ 1-й ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

Первые зоны Бриллюэна (в частности, изображенные на рис. 73, 75, 77) можно сложить в k -пространстве так, что они плотно заполнят все пространство волновых векторов. Эту же операцию можно провести иначе: одну первую зону Бриллюэна перемещать в k -пространстве в направлении линий, проведенных из ее центра (из начала координат k -пространства) ортогонально граням на расстояния, равные расстояниям между противоположными гранями. Центры зон после такого перемещения образуют в k -пространстве решетку.

Так, центры зон Бриллюэна для кубической гранецентрированной решетки после описанных трансляций образуют кубическую объемно-центрированную решетку. Элементарная ячейка этой решетки образована тремя взаимно перпендикулярными векторами длиной $4\pi/a$, направленными вдоль осей k_x , k_y и k_z , и одним вектором длиной $2\sqrt{3}\pi/a$, определяющим положение узла в центре куба (этот вектор идет из начала координат в направлении центра гексагональной грани зоны Бриллюэна).

Центры зоны для кубической объемно-центрированной решетки образуют кубическую гранецентрированную решетку, элементарный куб которой задается тремя векторами длиной $4\pi/a$, направленными вдоль осей k_x , k_y и k_z (эти векторы равны расстояниям между центрами зон Бриллюэна в направлении этих осей). Узлы в центрах граней задаются векторами длиной $2\sqrt{2}\pi/a$, определяющими расстояния между центрами зон в направлениях нормалей к граням зоны.

Очевидно также, что центры зон Бриллюэна для гексагональной плотноупакованной решетки образуют ГПУ-решетку с периодами $4\pi/c$ вдоль оси k_z и $4\pi/a$ вдоль нормали к боковым граням.

Таким образом, если заранее бы были известны решетки, образованные центрами первых зон Бриллюэна, заполняющих все k -пространство, то построение самих зон не представляло бы труда. Достаточно было бы выбрать какой-нибудь узел решетки за начало координат, соединить его прямыми линиями с ближайшими узлами и через центры этих линий провести нормальные к

ним плоскости. Построенные таким способом плоскости ограничивают в k -пространстве объем, являющийся первой зоной Бриллюэна для данного типа решетки.

Решетки, образованные центрами первых зон Бриллюэна, заполняющих все k -пространство, можно построить независимо для каждого типа исходной кристаллической решетки, так как они с

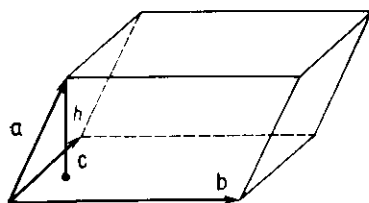


Рис. 78

точностью до множителя 2π совпадают с обратными решетками кристаллов. Если для данной кристаллической решетки построить обратную решетку и увеличить ее масштаб в 2π раз, то получится решетка, образованная центрами соответствующих зон Бриллюэна.

Рассмотрим кристаллическую решетку, основные трансляции которой заданы векторами $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$ (рис. 8). Обратной к ней называется

решетка с векторами основных трансляций $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$ и $\mathbf{c}^*$, которые определяются следующим образом:

$$\mathbf{a}^* = \frac{[\mathbf{bc}]}{a[\mathbf{bc}]}; \quad \mathbf{b}^* = \frac{[\mathbf{ac}]}{b[\mathbf{ac}]}; \quad \mathbf{c}^* = \frac{[\mathbf{ab}]}{c[\mathbf{ab}]} \quad (2.17)$$

Известно, что величина смешанного произведения $(\mathbf{a}[\mathbf{bc}])$ равна объему параллелепипеда, построенного на векторах $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$. Модуль векторного произведения $|\mathbf{bc}|$ дает площадь основания параллелепипеда, т. е. площадь грани, содержащей векторы $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$ (см. рис. 78). Следовательно, перпендикулярный основанию вектор $\mathbf{a}^* = [\mathbf{bc}]/(\mathbf{a}[\mathbf{bc}])$ по абсолютной величине равен $1/h$, где h — высота параллелепипеда.

Грани параллелепипеда, содержащие пары векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$ или $\mathbf{a}$ и $\mathbf{c}$, и параллельные им грани определяют три неэквивалентных семейства эквидистантных кристаллических плоскостей. Каждый из векторов $\mathbf{a}^*$, $\mathbf{b}^*$ и $\mathbf{c}^*$, задающих обратную решетку, ортогонален одному из этих семейств и равен абсолютной величине — обратному расстоянию между плоскостями семейства. Это свойство векторов обратной решетки позволяет использовать для ее построения следующий прием. Поясним его на примере построения обратной для ГЦК-решетки.

Рассмотрим атомы, расположенные на гранях одной элементарной ячейки (рис. 79). Через эти атомы проходят два типа семейств эквидистантных плоскостей с периодами $a/\sqrt{3}$ и $a/2$. Три семейства эквидистантных плоскостей с периодом $a/2$, перпендикулярных декартовым осям, определяют три вектора обратной решетки, совпадающие по направлению с декартовыми осями. Каждый из этих векторов $\mathbf{a}_x^*$, $\mathbf{a}_y^*$ и $\mathbf{a}_z^*$ по абсолютной величине равен обратному расстоянию $2/a$ между плоскостями (рис. 80).

Четыре семейства плоскостей с периодом $a/\sqrt{3}$, перпендикулярных четырём пространственным диагоналям куба, определяют четыре ортогональных им вектора обратной решетки b_1^* , b_2^* , b_3^* и b_4^* . Эти векторы исходят из вершин элементарного куба обратной решетки, построенного на векторах a_x^* , a_y^* , a_z^* , направлены вдоль его пространственных диагоналей и кончаются в центре этого куба. Поскольку они, таким образом, определяют только один узел обратной решетки — центр элементарного куба, из четырех векторов b_1^* , b_2^* , b_3^* и b_4^* достаточно использовать только один, например $b_1^* = b^*$ (рис. 80).

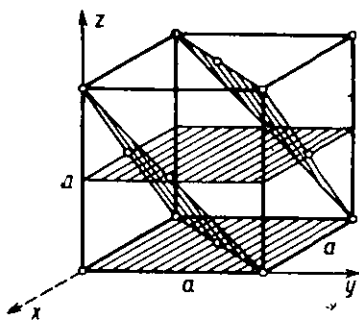


Рис. 79

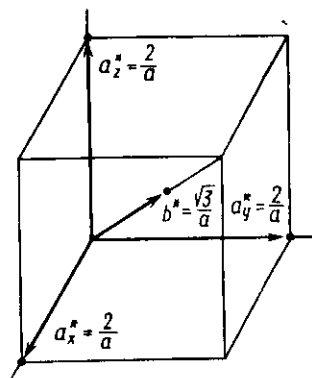


Рис. 80

Проведенное построение показывает, что для ГЦК-решетки с периодом a обратной является ОЦК-решетка с периодом $2/a$.

Приведем еще один пример построения обратной решетки. В качестве прямой решетки возьмем ОЦК-решетку с периодом a . Результат может быть получен и без геометрического построения. Он вытекает из того факта, что формулы для векторов обратной решетки (2.17) обратимы. Векторы прямой и обратной решеток являются взаимно обратными друг к другу: если из векторов a^* , b^* и c^* образовать три комбинации типа $[b^*c^*]/(a^*[b^*c^*])$ и т. д. и подставить в них выражения (2.17), то получатся векторы a , b , c . Поэтому для ОЦК-решетки с периодом a обратной, очевидно, будет ГЦК-решетка с периодом $2/a$.

Получим этот же результат путем геометрического построения. Для этого рассмотрим, как и ранее, атомы, расположенные в вершинах элементарного куба и в его центре. Одна ячейка определяет только два типа семейств плоскостей с периодами $a/\sqrt{2}$ и $a/2$. Плоскости семейств с периодом $a/2$ перпендикулярны декартовым осям. Одной из этих плоскостей является заштрихованная горизонтальная плоскость на рис. 81. Заштрихованная диагональная плоскость на этом же рисунке принадлежит одному из семейств с периодом $a/\sqrt{2}$.

Векторы a_1^* , a_2^* , a_3^* , соответствующие трем первым семействам с периодом $a/2$, направлены по декартовым осям пространства обратной решетки. Абсолютная величина этих векторов равна $2/a$; они определяют элементарный куб обратной решетки (рис. 82). Шести диагональным семействам эквидистантных плоскостей с периодом $a/\sqrt{2}$ соответствуют шесть векторов, которые определяют три узла в обратной решетке, расположенные в центре граней построенного куба. Поэтому из шести векторов достаточно использовать только три: b_1^* , b_2^* и b_3^* . Шесть векторов a_1^* , a_2^* , a_3^* и b_1^* , b_2^* , b_3^* определяют узлы ГЦК-решетки с периодом $2/a$.

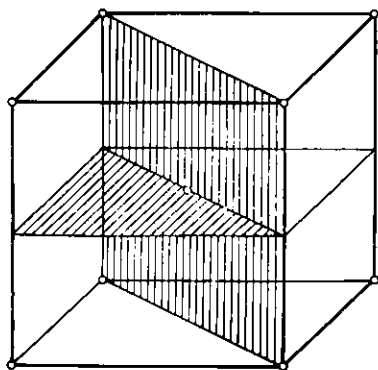


Рис. 81

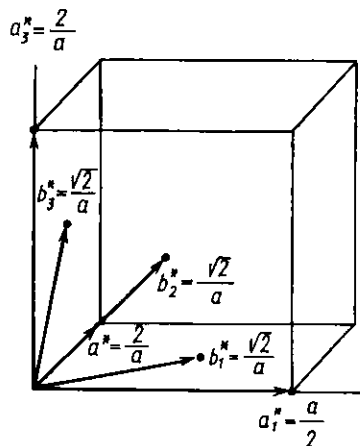


Рис. 82

Проведенные геометрические построения обратных решеток показывают, что пространство обратной решетки по размерности тождественно k -пространству. Легко убедиться, что при увеличении масштаба в обратном пространстве в 2π раз векторы основных трансляций $2\pi a_x^*$, $2\pi a_y^*$, $2\pi a_z^*$ и $2\pi b^*$ (см. рис. 80) и $2\pi a_1^*$, $2\pi a_2^*$, $2\pi a_3^*$, $2\pi b_1^*$, $2\pi b_2^*$, $2\pi b_3^*$ (см. рис. 82) определяют положение центров первых зон Бриллюэна в k -пространстве и, следовательно, периодичность зависимости энергии от волнового вектора в этих направлениях. Обозначим один из векторов обратной решетки через g . Тогда, очевидно,

$$\epsilon^{(0)}(\mathbf{k}) = \epsilon^{(0)}(\mathbf{k} + 2\pi\mathbf{g}). \quad (2.18)$$

Поскольку $\epsilon^{(0)}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$, то из (2.18) вытекает соотношение

$$k^2 = k^2 + 2 \cdot 2\pi(\mathbf{k} \cdot \mathbf{g}) + 4\pi^2 g^2,$$

откуда

$$(\mathbf{k} + \pi\mathbf{g}; \mathbf{g}) = 0. \quad (2.19)$$

Условие (2.19), определяющее положение поверхностей разрыва энергии в k -пространстве, имеет наглядный геометрический.

и физический смысл. Для выяснения его построим векторную диаграмму, соответствующую (2.19). Для этого поместим начало отсчета волнового вектора k в точку 0, совпадающую с концом вектора $2\pi g$. Проведем через середину вектора $2\pi g$ перпендикулярную ему плоскость B (рис. 83). Любой вектор, лежащий в этой плоскости, перпендикулярен вектору $2\pi g$ или g . Но вектор, лежащий в плоскости B , равен сумме векторов πg и k , если k оканчивается на плоскости B . Таким образом, конец вектора k , удовлетворяющего уравнению (2.19), задает все точки плоскости B . Чтобы найти все возможные значения k , удовлетворяющие (2.19), необходимо задать все векторы обратной решетки g . Векторы g выражаются через базис обратной решетки a^* , b^* и c^* следующим образом:

$$g = n_1 a^* + n_2 b^* + n_3 c^*, \quad (2.20)$$

где n_1 , n_2 , n_3 — целые числа. Совокупность плоскостей, проходящих через середины векторов $2\pi g$ и перпендикулярных к ним, дает, таким образом, все плоскости разрыва энергии в k -пространстве.

Приведенные соображения являются обоснованием следующей простой методики построения первой зоны Бриллюэна. Для заданной решетки строится обратная, после чего масштаб пространства обратной решетки увеличивается в 2π раз. Затем любой выбранный узел обратной решетки соединяется прямыми с ближайшими соседними узлами. Через середины полученных отрезков проводятся перпендикулярные им плоскости. Объем, ограниченный этими плоскостями, и будет первой зоной Бриллюэна.

Такой метод построения первой зоны Бриллюэна был впервые предложен Вигнером и Зейтцем. В связи с этим первая зона Бриллюэна иногда называется ячейкой Вигнера — Зейтца в обратном пространстве. Ячейки Вигнера — Зейтца, построенные около каждого узла обратной решетки, плотно заполняют все обратное пространство.

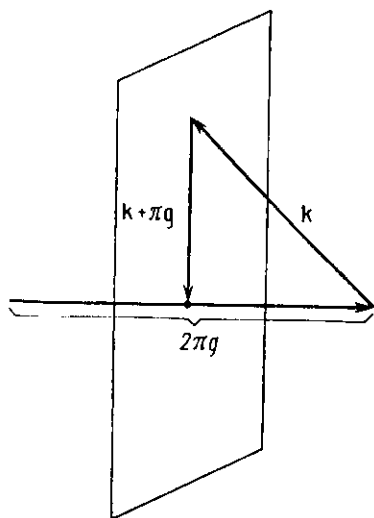


Рис. 83

§ 4. ЗАПОЛНЕНИЕ ЭЛЕКТРОНАМИ ЗОНЫ БРИЛЛЮЭНА

После того как выяснено положение поверхностей разрыва энергии в k - или p -пространстве и найдены зоны Бриллюэна для решеток различного типа, можно приступить к построению энерге-

тического спектра электронов^{*)}. Нашей целью при этом является нахождение границы фермиевского распределения электронов, т. е. поверхности Ферми. Заметим, что для построения поверхности Ферми в p -пространстве не имеет значения, являются ли электроны в металле ферми-газом или ферми-жидкостью, так как в обоих случаях электроны подчиняются статистике Ферми—Дирака и каждый электрон в p -пространстве занимает один и тот же объем.

Для выяснения механизма, приводящего к образованию сложных изоэнергетических поверхностей в зонах, рассмотрим, как заполняется электронами зона Бриллюэна для плоской квадратной решетки с периодом a . Напомним, что два электрона занимают в плоском p -пространстве площадь, равную $(2\pi\hbar)^2/S$, где S — площадь кристалла. Поэтому при увеличении числа электронов растет величина фермиевского импульса, определяющего границу заполненной области.

Как было показано ранее, первая зона Бриллюэна для плоской квадратной решетки представляет собой квадрат со стороной $2\pi\hbar/a$, расположенный симметрично по отношению к началу координат в p -пространстве. В центре первой зоны Бриллюэна находится минимум энергии, поскольку при $p=0$ ϵ также равно нулю.

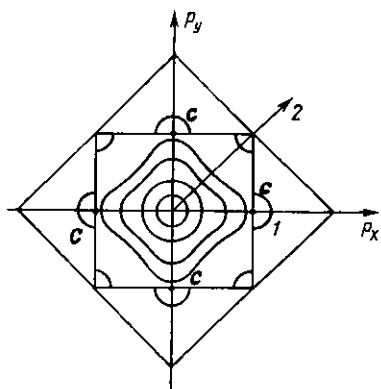


Рис. 84

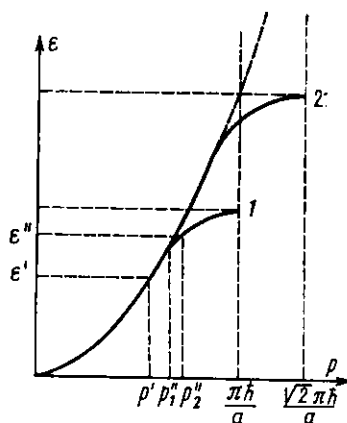


Рис. 85

Выберем два направления из центра зоны (рис. 84): 1 — к ближайшей точке на границе (это направление совпадает с направлением осей p_x и p_y) и 2 — к наиболее удаленной точке границы по направлению диагоналей квадрата.

^{*)} k - и p -пространства отличаются только масштабным множителем $\hbar$, так как $p = \hbar k$.

Расстояния от начала координат до границ первой зоны по этим направлениям соответственно равны $\pi\hbar/a$ и $\sqrt{2}\pi\hbar/a$. Зависимости ϵ от p вдоль каждого из направлений показаны на рис. 85 (кривые 1 и 2). Для малых импульсов вблизи центра первой зоны закон дисперсии близок к квадратичному: $\epsilon = \frac{p^2}{2m_0}$ и изоэнергетические кривые $\epsilon(p) = \text{const}$ близки к окружностям с радиусом $p = \sqrt{2m_0\epsilon}$. По мере приближения к границе зоны зависимость ϵ от p начинает отклоняться от параболической.

В направлении 1 граница зоны расположена в $\sqrt{2} \approx 1,41$ раза ближе, чем в направлении 2. Благодаря этому отклонение функции $\epsilon(p)$ от параболы в первом случае происходит при меньших значениях импульса. В области малых импульсов (p меньше некоторого значения p' , которому соответствует энергия электрона ϵ') кривые 1 и 2 на рис. 85 практически совпадают друг с другом и с параболой $\epsilon = \frac{p^2}{2m_0}$. При $p > p'$ кривая 1 идет ниже кривой 2 так, что одной и той же энергии (например, $\epsilon = \epsilon''$) вдоль направления 1 соответствуют большие импульсы (p_2''), чем вдоль направления 2 (p_1'').

Это означает, что изоэнергетические кривые $\epsilon(p) = \text{const}$, бывшие при $\epsilon < \epsilon'$ концентрическими окружностями с радиусом $p = \sqrt{2m_0\epsilon}$, начинают как бы притягиваться к серединам границ зоны Бриллюэна, расположенным наиболее близко к центру зоны. Степень искажения изоэнергетических кривых определяется близостью их к границе зоны и величиной псевдопотенциала $|V_{\text{эф}}|$ (см. рис. 62). Очевидно, что при $|V_{\text{эф}}| = 0$ никакого искажения не будет происходить вообще, а сами границы зон Бриллюэна исчезнут.

При увеличении концентрации электронов «выступы» искаженной окружности Ферми приближаются к границам в четырех эквивалентных направлениях 1. Поскольку касание поверхности Ферми с границей зоны Бриллюэна невозможно, то при некотором малом расстоянии между «выступами» и границей в точках с должна произойти качественная перестройка изоэнергетической кривой, в результате которой нормаль к кривой вблизи границы зоны становится параллельной границе, а сама кривая, бывшая замкнутой, разрывается и пересекает границу под прямым углом. Происходит качественное изменение топологии изоэнергетической кривой, при котором замкнутая односвязная кривая переходит в многосвязную. Аналогичное изменение происходит и в трехмерном случае. Замкнутая односвязная поверхность Ферми в p -пространстве переходит в многосвязную.

Характер дальнейшего изменения кривой Ферми при увеличении концентрации электронов зависит от величины разрыва энергии $\Delta\epsilon = 2|V_{\text{эф}}|$ на границе зоны. Задача перестает быть однозначной. Появляются две различные возможности.

1. Разрыв энергии $\Delta\epsilon$ настолько велик, что минимум энергии во второй энергетической зоне $\epsilon_{\min}^{\text{II}}$ лежит выше максимума энергии в первой энергетической зоне $\epsilon_{\max}^{\text{I}}$. Заметим, что максимумы энергии в первой зоне Бриллюэна расположены в ее углах, а минимумы энергии во второй зоне Бриллюэна — в четырех эквивалентных точках c , соответствующих значениям импульса:

$$p_x = \pm \frac{\pi\hbar}{a}; p_y = 0 \text{ и } p_x = 0; p_y = \pm \frac{\pi\hbar}{a}.$$

В этом случае при увеличении концентрации n электронов энергетически выгодно заполнение всех разрешенных состояний в первой зоне. Полное число разрешенных состояний в зоне равно удвоенному числу атомов $2N$. Поэтому в рассматриваемом случае двухвалентные вещества являются диэлектриками или полупроводниками в зависимости от того, насколько велик интервал запрещенных энергий между зонами, равный разности $\epsilon_{\min}^{\text{II}} - \epsilon_{\max}^{\text{I}}$. Расположение зон при $\epsilon_{\min}^{\text{II}} > \epsilon_{\max}^{\text{I}}$ схематически показано на рис. 86.

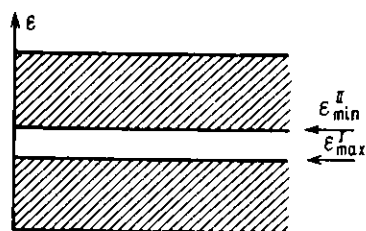


Рис. 86

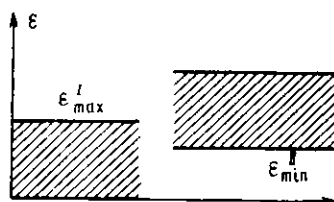


Рис. 87

2. Разрыв энергии $\Delta\epsilon$ невелик, минимум энергии во второй зоне лежит ниже максимума энергии в первой ($\epsilon_{\min}^{\text{II}} < \epsilon_{\max}^{\text{I}}$, рис. 87).

В этом случае заполнение первой зоны происходит только до уровня энергии ϵ , равного $\epsilon_{\min}^{\text{II}}$. При больших значениях энергетически выгодно становится заполнение свободных состояний во второй зоне (естественно, одновременно с заполнением свободных состояний в первой зоне) около точек c , соответствующих минимальным значениям энергии (см. рис. 84). При количестве электронов, равном $2N$, углы первой зоны останутся еще незаполненными. Вторая зона заполнится лишь частично, причем число электронов в ней будет равно числу оставшихся незаполненными свободных мест в первой зоне.

При такой ситуации двухвалентные вещества являются металлами. В трехмерном случае подобные условия реализуются для всех элементов II группы периодической системы Менделеева.

§ 5. ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ ЭЛЕМЕНТОВ I ГРУППЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ МЕНДЕЛЕЕВА

Проведенный в предыдущем параграфе анализ изменения формы изоэнергетической поверхности при заполнении электронами первой зоны Бриллюэна достаточен, чтобы предсказать наиболее вероятный вид поверхности Ферми у элементов I группы периодической системы Менделеева. К ним относятся щелочные металлы (Li, Na, K, Rb), имеющие при комнатной температуре ОЦК-решетку, а также металлы Cu, Ag, Au, имеющие ГЦК-решетку.

Начнем со щелочных металлов. Первая зона Бриллюэна для ОЦК-решетки была построена в § 2 настоящей главы и представляет собой ромбический додекаэдр (см. рис. 73). Все грани додекаэдра одинаковы и расположены на одном и том же расстоянии от центра зоны, равно $\sqrt{2}\pi\hbar/a$, где a — период решетки. У щелочных металлов N валентных электронов заполняют половину объема первой зоны. Сделаем предположение, что часть пространства первой зоны Бриллюэна, заполненная электронами, ограничена поверхностью Ферми, достаточно близкой к сферической, и вычислим ее средний радиус p_F . Величина p_F определится из равенства

$$\frac{4}{3}\pi p_F^3 = V_p/2.$$

Объем зоны Бриллюэна V_p (объем ромбического додекаэдра) составляет $2\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^3$, откуда имеем

$$p_F = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3} \frac{\pi\hbar}{a} \simeq 1,242 \frac{\pi\hbar}{a}.$$

Минимальное расстояние между идеальной сферой Ферми с таким радиусом и границей первой зоны равно

$$\sqrt{2} \frac{\pi\hbar}{a} - p_F \simeq 0,172 \frac{\pi\hbar}{a}.$$

Иными словами, радиус сферы Ферми p_F составляет приблизительно 83% от минимального расстояния от начала координат до граней первой зоны Бриллюэна. Поскольку величина эффективного потенциала, вообще говоря, невелика, то можно ожидать, что при таком относительно большом расстоянии от сферы Ферми до граней зоны Бриллюэна их искажающее влияние на форму поверхности Ферми будет также невелико. Однако радиус сферы Ферми не настолько мал, чтобы искажение реальной изоэнергетической поверхности у щелочных металлов из-за близости ее к границе зоны было совершенно незаметным. Ожидаемые небольшие отклонения поверхности Ферми от сферы, очевидно, должны иметь характер двенадцати выпуклостей, расположенных в на-

правлениях кратчайших расстояний от центра зоны до ее граней (рис. 88).

Небольшое отклонение поверхности Ферми от сферы количественно можно охарактеризовать величиной анизотропии поверхности

$$\frac{\Delta S}{S} = 2 \frac{S_{\max} - S_{\min}}{S_{\max} + S_{\min}},$$

где $S_{\max}$ и $S_{\min}$ — максимальная и минимальная величины площадей сечения поверхности Ферми плоскостями, проходящими через центр зоны Бриллюэна. Для сферы, очевидно, $\Delta S/S=0$.

Выпишем экспериментально определенные значения анизотропии поверхности Ферми щелочных металлов:

Металл	Na	K	Rb	Cs
$\frac{\Delta S}{S}, \%$	0,2	0,6	0,7	1,4

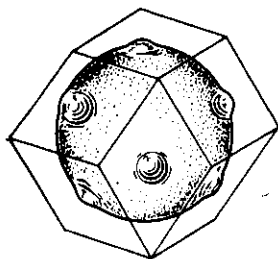


Рис. 88

Видно, что анизотропия поверхности Ферми не превосходит 1,5%. Поэтому замена реальной поверхности Ферми сферой приводит лишь к незначительной ошибке. Увеличение анизотропии $\Delta S/S$ вместе с ростом атомного номера в ряду щелочных металлов указывает на увеличение псевдопотенциала $|V_{\text{эф}}|$ в результате усложнения строения атомного остова. Этот результат очень интересен также потому, что он указывает на малость эффективного рассеивающего потенциала ионов в решетках щелочных металлов.

Рассмотрим теперь металлы I группы, имеющие ГЦК-решетку (Cu, Ag, Au). Первая зона Бриллюэна в этом случае является кубооктаэдром (см. рис. 75), который менее симметричен, чем ромбический додекаэдр. Наиболее близкие к центру восемь шестиугольных граней зоны отстоят от него на расстоянии $\sqrt{3}\pi\hbar/a$. Шесть квадратных граней расположены на расстоянии $2\pi\hbar/a$ от центра. Объем кубооктаэдра V_p равен $4 \left(\frac{2\pi\hbar}{a} \right)$. Он также наполовину заполнен электронами. Радиус p_F идеальной сферы Ферми в этом случае составляет $\left(\frac{3}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{2\pi\hbar}{a} \simeq 1,56 \frac{\pi\hbar}{a}$ и только приблизительно на 9,8% отличается от минимального расстояния от центра до границы зоны, приблизительно равного $1,73 \frac{\pi\hbar}{a}$.

Кроме того, вследствие более сложного строения ионных остовов эффективный потенциал $|V_{эф}|$ у меди, серебра и золота значительно превосходит $|V_{эф}|$ у щелочных металлов.

Большая степень близости сферы Ферми к границам зоны позволяет ожидать существенного искажения поверхности Ферми вблизи центров шестиугольных граней. Экспериментально установлено, что поверхность Ферми вблизи этих точек раскрывается и как бы присасывается к границам зоны. Это приводит к каче-

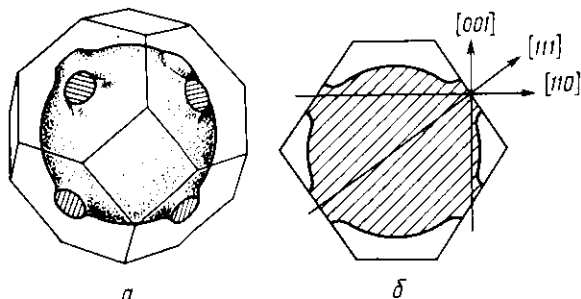


Рис. 89

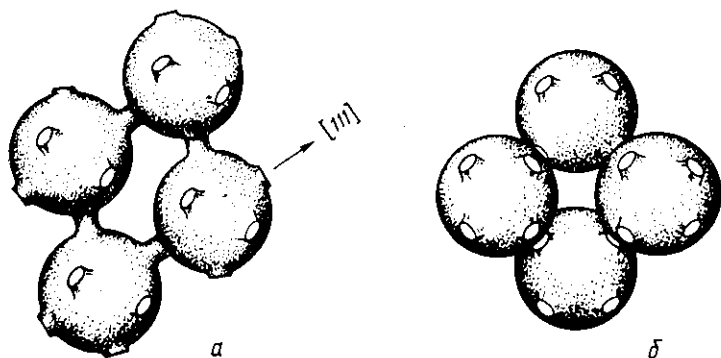


Рис. 90

ственному изменению топологии поверхности Ферми, которая из закрытой односвязной поверхности превращается в открытую. На рис. 89 показаны поверхность Ферми в первой зоне Бриллюэна у Cu, Ag, Au и ее сечение вертикальной плоскостью симметрии, проходящей через ось p_z ($[001]$) и биссектрису $[110]$ угла между осями p_x и p_y .

Поскольку энергия является периодической функцией импульса, полученную поверхность Ферми в первой зоне Бриллюэна можно транслировать на периоды основных трансляций в $\mathbf{p}$ -пространстве. Эта операция приводит к поверхности, которая имеет четыре направления открытости и проходит через все $\mathbf{p}$ -про-

странство. Вид такой поверхности и вид ее сечения плоскостью симметрии (такой же, как и на рис. 89) показаны на рис. 90 и 91 соответственно.

Таким образом, поверхность Ферми у меди, серебра и золота образует систему сфер, соединенных между собой узкими перемычками («шейками») в направлении пространственных диагоналей [111]. Такое строение поверхности Ферми экспериментально впервые обнаружено Пиппардом.

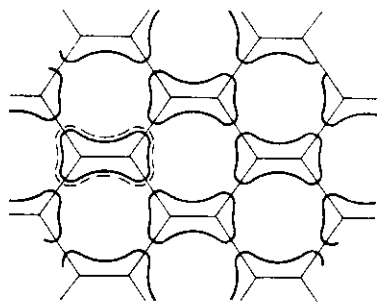


Рис. 91

Сферическая часть поверхности в специальной литературе получила название «пузо». Диаметр «шеек» между сферами сильно зависит от величины псевдопотенциала. С ростом атомного номера в ряду Cu, Ag, Au усложняется строение ионного остова металла. Это приводит к увеличению $|V_{эф}|$ и диаметра «шейки» поверхности Ферми.

Выше указывалось, что ОЦК-решетка щелочных металлов является термодинамически неустойчивой и при понижении температуры переходит в ГЦК-решетку. Можно ожидать, что при таком пере-

ходе близкие к сферическим поверхности Ферми, характерные для ОЦК-фазы, должны испытывать сильные искажения в направлениях к центрам шестиугольных граней зоны Бриллюэна для ГЦК-фазы, т. е. в направлениях пространственных диагоналей куба. Если бы величина $|V_{эф}|$ у щелочных металлов была такая же, как у золота, серебра и меди, то в результате этого искажения поверхность Ферми настолько сильно приблизилась бы к центрам граней, что произошел бы разрыв сфероподобных поверхностей с образованием открытой поверхности, изображенной на рис. 90. Однако поскольку эффективный потенциал у щелочных металлов меньше, чем у благородных и меди, то можно ожидать или достаточно сильного искажения поверхности Ферми без перехода в открытую, или возникновения открытых поверхностей со значительно более тонкими перемычками («шейками»). Образование открытой поверхности наиболее вероятно у Cs, имеющего наибольшую среди щелочных металлов величину $|V_{эф}|$.

§ 6. МЕТОД ХАРРИСОНА ПОСТРОЕНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ ФЕРМИ

Метод Харрисона основан на том, что слабый эффективный потенциал $V_{эф}(r)$ вносит достаточно малое возмущение в движение свободного электрона во всем фазовом пространстве, за исключением областей, близких к границам зон Бриллюэна. Поверх-

ность Ферми электронов является сферой, если она достаточно удалена от границ зон. Искажение сферы Ферми связано только с конечными разрывами $\Delta\epsilon$ энергии на границах, которые определяются величиной $2|V_{\text{эф}}|_g$. Поэтому, если $|V_{\text{эф}}|$ очень мал, поверхность Ферми сохраняет сферическую форму даже в непосредственной близости к плоскостям разрыва энергии. Так, если разрывы $\Delta\epsilon$ энергии на границе зоны станут меньше величины $\delta\epsilon$ неопределенности энергии электрона, найденной из соотношения Гейзенберга $\delta\epsilon \cdot \tau \gtrsim \hbar$ (τ — время жизни частицы), то зонный характер спектра перестанет сказываться на движении электрона. В этом случае интервал запрещенных энергий $\Delta\epsilon$ фактически исчезнет. То же самое произойдет, если при уменьшении $|V_{\text{эф}}|$ величина $\Delta\epsilon$ станет много меньше энергии тепловых колебаний kT . Следовательно, при сколь угодно малом $|V_{\text{эф}}|$ поверхность Ферми может пересечь границы нескольких зон Бриллюэна, не «замечая» каркаса, образованного плоскостями разрыва энергии.

Будем поступать следующим образом. Допустим вначале, что $|V_{\text{эф}}|$ пренебрежимо мал. В этом случае из центра первой зоны Бриллюэна можно описать сферу Ферми любого радиуса r_F (т. е. сферу Ферми, содержащую любое число электронов), которая без искажения пересечет целый ряд границ зон.

Сделаем затем $|V_{\text{эф}}|$ отличным от нуля. Это приведет к тому, что на границах зон появятся разрывы энергии и поверхность сферы исказится таким образом, чтобы пересечь границы под прямыми углами. При этом сфера разделится на несколько частей. Одновременно с этим энергия становится периодической функцией в $\mathbf{r}$ -пространстве, что позволяет смещать (транслировать) части изоэнергетической поверхности на векторы основных трансляций. Таким способом можно построить изоэнергетические поверхности в различных зонах. В этом заключается основная идея построения поверхностей Ферми, предложенная Харрисоном.

Основным допущением, лежащим в основе метода Харрисона, является предположение о том, что сфера Ферми, построенная при $|V_{\text{эф}}|=0$, при конечном значении псевдопотенциала претерпевает искажения только вблизи самих границ зон и тем меньше, чем меньше величина $|V_{\text{эф}}|$. Иными словами, предполагается, что от состояния свободных электронов можно непрерывно перейти к новому качественному состоянию, когда электроны находятся в поле периодического потенциала, взаимодействие с которым приводит к возникновению брэгговских отражений электронов от решетки с импульсами, соответствующими границам зон.

Метод Харрисона дает хорошие результаты при построении поверхностей Ферми для всех одновалентных и поливалентных непериодических металлов, т. е. для металлов, внутренние электронные оболочки ионных остовов которых заполнены. Для этих металлов даже простое приближение модели почти свободных электронов позволяет получить достаточно хорошее качественное

представление о форме изоэнергетических поверхностей в зонах. По существу, это приближение основано на возможности разделения электронов на атомные (т. е. электроны внутренних оболочек, которые не принимают участия в металлической проводимости) и коллективизированные (электроны, которые заполняют внешнюю оболочку в изолированном атоме металла, а в кристалле металла являются носителями тока). Поэтому метод Харрисона применим прежде всего к непреходным металлам, у которых металлические свойства связаны с перекрытием волновых функций валентных s - и p -электронов. Применимость этого метода к переходным металлам определяется степенью гибридизации s - и p -состояний с электронами незаполненных внутренних d - и f -оболочек. В тех случаях, когда гибридизация мала (волновые функции s - и p -электрона не перекрываются с волновыми функциями d - и f -электронов), валентные электроны можно рассматривать как квазисвободные и использовать для построения поверхности Ферми в первом приближении метод Харрисона. К таким металлам относятся одновалентные металлы Cu, Ag, Au и двухвалентные — Zn, Cd и Hg. При сильной гибридизации почти свободных s - и p -электронов и связанных с ионами электронов внутренних незаполненных оболочек приближение слабой связи становится некорректным.

Объем Δ в p -пространстве, занятый электронами для металла валентности z , равен

$$\Delta = \frac{V_p}{2N} zN = \frac{z}{2} V_p, \quad (2.21)$$

где V_p — объем зоны Бриллюэна, а $\frac{V_p}{2N}$ — объем, приходящийся на одно электронное состояние в зоне. Объем сферы Харрисона $\frac{4}{3} \pi r_F^3$ совпадает с Δ и, следовательно, определяется только типом и параметрами кристаллической решетки (через величину V_p) и валентностью металла z :

$$r_F = \left(\frac{3zV_p}{8\pi} \right)^{1/3}. \quad (2.22)$$

В двухмерном случае сфера Харрисона вырождается в окружность Харрисона, радиус r_F которой равен

$$r_F = \left(\frac{zS_p}{2\pi} \right)^{1/2}, \quad (2.23)$$

где S_p — площадь двумерной зоны Бриллюэна в p -пространстве.

Для простоты и наглядности проведем вначале построение «поверхности» Ферми для гипотетического трехвалентного металла ($z=3$), имеющего плоскую квадратную решетку с периодом a .

Площадь S_p зоны Бриллюэна для такой решетки составляет $\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^2$. Согласно (2.23)

$$\rho_F = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right) \simeq 1,386 \frac{\pi\hbar}{a}. \quad (2.24)$$

Из центра первой зоны Бриллюэна (см. рис. 68 и 92) проводим окружность Харрисона. Поскольку радиус $\rho_F \simeq 1,386 \frac{\pi\hbar}{a}$ меньше, чем расстояния до углов первой зоны, равные $\sqrt{2} \frac{\pi\hbar}{a}$, часть площади первой зоны в окрестности ее углов окажется за пределами окружности Харрисона (рис. 92). С другой стороны, внутрь окружности Харрисона попадает некоторая площадь во второй зоне Бриллюэна. Отсюда следует, что у рассматриваемого «металла» первая зона не целиком заполнена электронами; кроме того, имеются небольшие заполненные области во второй зоне. Напомним еще раз, что, проводя таким образом окружность Харрисона, мы предполагаем $|V_{\text{эф}}| = 0$. Будем считать теперь $|V_{\text{эф}}|$ отличным от нуля. При этом, как и в одномерном случае (см. рис. 62), происходит следующее:

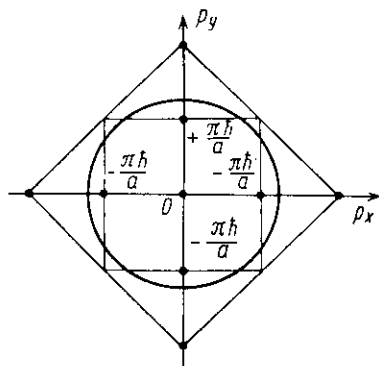


Рис. 92

1) появляются разрывы энергии на границах зон (строго говоря, при $|V_{\text{эф}}| = 0$ зон, т. е. поверхностей брэгговского отражения, вообще не было, и они появляются лишь при $|V_{\text{эф}}| \neq 0$);

2) энергия становится периодической функцией в $\mathbf{p}$ -пространстве с периодом основных трансляций $2\pi\hbar/a$ по осям p_x и p_y .

В результате появления разрывов энергии на границах зон окружность Харрисона разрывается на границах и образует отдельные «куски» изоэнергетических кривых в зонах, как показано на рис. 93.

Проведем трансляцию этих «кусков» на периоды $2\pi\hbar/a$ вдоль осей p_x и p_y . Из «кусков» изоэнергетических кривых в первой зоне после трансляции можно построить замкнутые изоэнергетические кривые, расположенные в углах зоны (рис. 94). Аналогично из «кусков» кривых во второй зоне образуются замкнутые изоэнергетические кривые на сторонах квадрата (рис. 95). Совокупность всех изоэнергетических кривых в первой и во второй зонах образует двухмерную кривую Ферми. Заметим, что из кусков изоэнергетической кривой, расположенных в первой зоне, можно построить только одну замкнутую кривую, изображенную на рис. 94 (естественно, что вследствие трансляционной симметрии

эта кривая повторяется в p -пространстве с периодом $2\pi\hbar/a$ в направлении осей p_x и p_y). Если площадь $S'(\epsilon)$, ограниченную этой кривой, разделить на элементарную площадку $\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^2/2N$, приходящуюся на одно электронное состояние, то мы получим пол-

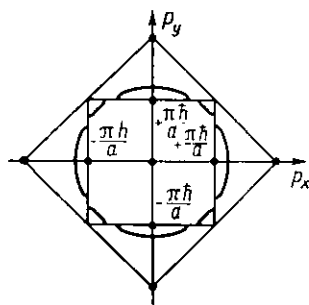


Рис. 93

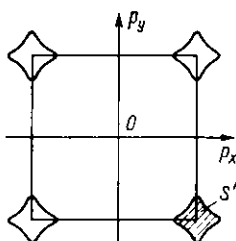


Рис. 94

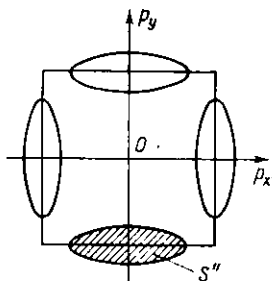


Рис. 95

ное число вакантных мест n_1' (незаполненных состояний) в первой энергетической зоне:

$$n_1' = 2 \frac{S'(\epsilon)}{(2\pi\hbar)^2} a^2 N, \quad (2.25)$$

где N — число атомов в решетке. Так как $a^2 N$ дает полную площадь двумерной решетки, количество вакантных мест на единицу площади решетки равно

$$n_{\perp} = \frac{n_1'}{a^2 N}, \quad n_1 = \frac{2S'(\epsilon)}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (2.26)$$

Из кусков изоэнергетической кривой, расположенных во второй зоне, можно построить две замкнутые кривые, которые изображены на рис. 95. Площадь $S''(\epsilon)$, ограниченная каждой из этих кривых, составляет только половину площади, занятой электронами во второй зоне. Число электронных состояний n_2'' во второй зоне будет равно

$$n_2'' = \frac{2S''(\epsilon)}{\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^2} 2N = \frac{4S''(\epsilon)}{(2\pi\hbar)^2} a^2 N, \quad (2.27)$$

откуда концентрация n_2 электронов во второй энергетической зоне:

$$n_2 = 2 \frac{2S''(\epsilon)}{(2\pi\hbar)^2}. \quad (2.28)$$

Выясним, как изменится форма изоэнергетических кривых в зонах, если валентность z рассматриваемого металла увеличить с трех до четырех. Радиус окружности Харрисона в этом случае равен

$$p_F = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{2\pi\hbar}{\pi} \right) \approx 1,6 \frac{\pi\hbar}{a}. \quad (2.29)$$

Окружность Харрисона с таким радиусом содержит первую зону Бриллюэна целиком внутри себя и проходит через вторую, третью и четвертую зону (рис. 96). Переход от $|V_{эф}|=0$ к конечному

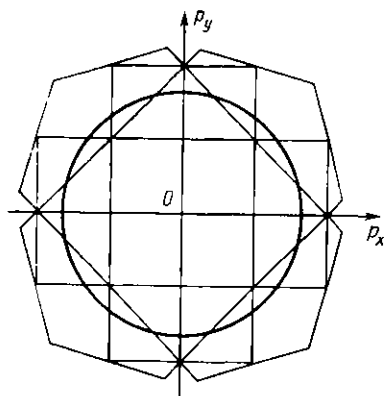


Рис. 96

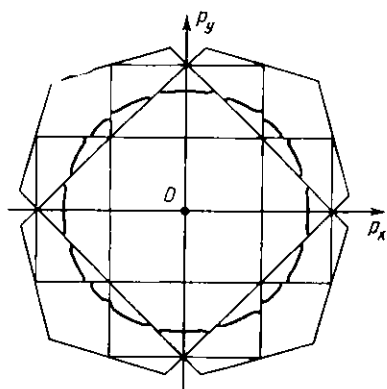


Рис. 97

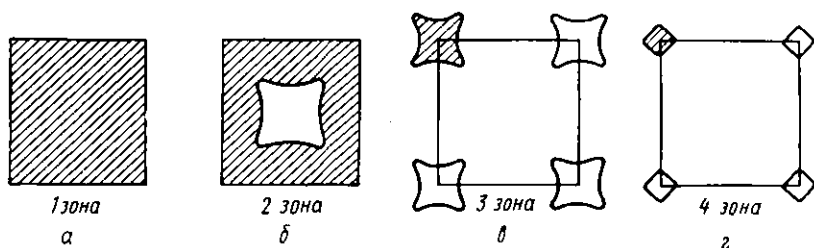


Рис. 98

эффективному потенциалу вызывает разрывы окружности Харрисона на границах зон: изоэнергетические кривые могут пересекать границы зон Бриллюэна только под прямыми углами (рис. 97).

Для построения замкнутых изоэнергетических кривых в различных зонах проведем трансляцию кусков окружности Харрисона на периоды $2\pi\hbar/a$ по осям p_x и p_y . Поскольку первая зона заполнена целиком, изоэнергетические кривые в ней отсутствуют (рис. 98, а). Кривые постоянной энергии во второй, третьей и четвертой зоне показаны на рис. 98, б, в и г соответственно. Легко

убедиться, что каждой зоне соответствует только одна замкнутая кривая.

Допустим, что радиус p_F окружности Харрисона слегка увеличился (в результате увеличения числа электронов). При этом увеличиваются заполненные электронами площади в 3-й и 4-й зоне, а ограниченная замкнутой кривой пустая площадь во 2-й зоне — уменьшается. Уменьшение последней связано с тем, что электронов во 2-й зоне становится больше, и это приводит к уменьшению числа вакантных мест.

Различие в характере изменения площадей, ограниченных кривыми $\epsilon(p) = \epsilon_F$ в различных зонах, при изменении числа электронов позволяет провести разделение изоэнергетических кривых на две группы: электронные и дырочные. К первой относятся изоэнергетические кривые (или поверхности в трехмерном случае), которые ограничивают площади (объемы), заполненные электронами. Ко второй — изоэнергетические кривые (поверхности), ограничивающие пустое пространство. Таким образом, в четырехвалентном металле с плоской квадратной решеткой энергетическая кривая во 2-й зоне является дырочной, а кривые в 3-й и 4-й зонах — электронными. В целиком заполненной 1-й зоне электроны не принимают участия в физических процессах, и эта зона может вообще не рассматриваться.

Исходя из приведенной классификации электронами называют квазичастицы, находящиеся на изоэнергетических поверхностях электронного типа. Квазичастицы, расположенные на изоэнергетических поверхностях дырочного типа, называют дырками.

Описанное выше построение изоэнергетических кривых на примере двумерного металла можно обобщить на случай трех измерений. Однако определение изоэнергетических поверхностей у реальных трехмерных металлов представляет значительную трудность, так как требует предварительного построения нескольких зон Бриллюэна и нахождения кусков сферы Харрисона в этих зонах. Существует способ, при помощи которого можно упростить конструирование изоэнергетических поверхностей в различных зонах. Рассмотрим еще раз последовательность основных этапов проведенного выше построения.

Прежде всего обратим внимание на то, что при построении изоэнергетических поверхностей мы исходили из непериодической в p -пространстве картины так называемых расширенных зон Бриллюэна, т. е. из последовательности зон всевозрастающего номера, пристроенных одна к другой вокруг первой зоны Бриллюэна. Далее из центра первой зоны строилась одна окружность (сфера) Харрисона и находились куски кривой $\epsilon(p) = \epsilon_F$ в различных зонах. Переход к периодической в p -пространстве картине осуществлялся лишь на последнем этапе, когда при помощи трансляций отдельных кусков строились замкнутые кривые (поверхности) в зонах. Этот последний этап имеет принципиальное значение, так как только в результате его энергия становится

многозначной и периодической функцией импульса. Однако переход к периодической картине можно провести предварительно. Такая операция, как будет видно далее, позволяет упростить построение поверхности Ферми.

Вместо того чтобы рассматривать исходную непериодическую картину расширенных зон, можно заранее протранслировать в 1-ю зону Бриллюэна границы разрыва энергии во 2-й, 3-й и т. д. зонах. Для плоской квадратной решетки с периодом a результат такой процедуры для первых трех зон Бриллюэна иллюстрируется рис. 99.

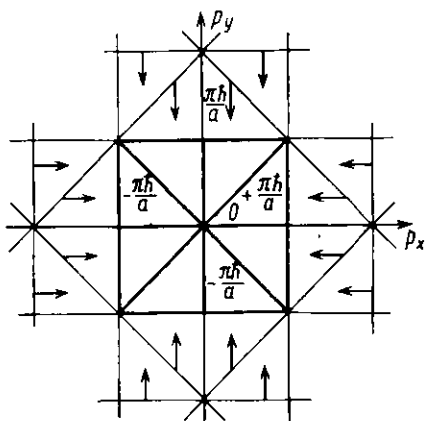


Рис. 99

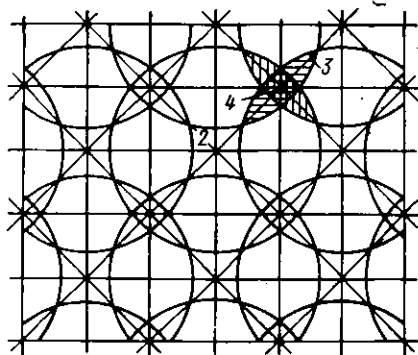


Рис. 100

После такой процедуры первая зона Бриллюэна содержит не только набор физически различных значений квазиимпульса, но и все возможные прямые (плоскости), на которых энергия испытывает разрывы. Тем самым мы заранее переходим к периодической картине в p -пространстве: пристроенные друг к другу первые зоны Бриллюэна с содержащимися внутри ее поверхностями разрыва энергии образуют периодическую структуру в p -пространстве.

Представим себе в p -пространстве мозаику, сложенную из приставленных друг к другу первых зон Бриллюэна. Такая структура получила название картины повторяющихся зон. Все соседние зоны эквивалентны между собой. Если ранее мы проводили одну окружность (сферу) Харрисона из центра 1-й зоны и рассматривали ее границы во 2-, 3-й и т. д. зонах, то теперь центр каждой зоны можно рассматривать как начало координат и проводить из него окружности (сферы) Харрисона. Результат такой операции для четырехвалентного металла с плоской квадратной решеткой представлен на рис. 100. Окружности Харрисона, проведенные из центров соседних зон, пересекаются между собой и образуют замкнутые изоэнергетические кривые, так как центры

повторяющихся зон отстоят друг от друга на векторы основных трансляций. В результате автоматически получается та же самая картина, которая была построена выше для этого случая путем трансляции «кусков» окружности Харрисона из соседних зон.

Анализируя полученную картину, можно установить следующие закономерности:

1) области, ограниченные кусками линий отрицательной кривизны (линиями, вогнутыми внутрь), принадлежащие одновременно k окружностям, представляют собой области, ограниченные дырочными изоэнергетическими кривыми в $(k+1)$ -й энергетической зоне;

2) области, ограниченные кусками линий положительной кривизны (выпуклыми кривыми) и принадлежащие одновременно к k -й и более окружностям, представляют собой области, ограниченные электронными изоэнергетическими кривыми в k -й энергетической зоне.

Проиллюстрируем сказанное на рис. 100. Область, ограниченная замкнутой изоэнергетической кривой во 2-й зоне, принадлежит только к одной окружности, проведенной из центра 1-й зоны. Она ограничена изоэнергетической кривой дырочного типа (отрицательной кривизны по отношению к внутренней области). Области, заштрихованные косой и двойной штриховкой (на рис. 100), так называемые «розетки», принадлежат одновременно трем и четырем окружностям. Они ограничены линиями положительной кривизны. Их граница, следовательно, является электронной изоэнергетической кривой в 3-й зоне. Центральная часть «розетки», которая заштрихована двойной штриховкой, принадлежит одновременно четырем окружностям. Ее граница состоит из «кусков» кривых положительной кривизны и, следовательно, является электронной изоэнергетической кривой в 4-й зоне.

Для того чтобы обобщить приведенные правила классификации изоэнергетических линий на случай трех измерений, достаточно только заменить слова линии и площади на слова поверхности и объемы соответственно. Однако в трехмерном случае классификация изоэнергетических поверхностей усложняется тем, что некоторые поверхности могут иметь одновременно области как положительной, так и отрицательной кривизны по отношению к ограничиваемому ими объему. Такие поверхности не могут быть однозначно отнесены к электронному или дырочному типу, и проведенная ранее классификация для них является в значительной мере условной.

Перейдем теперь к построению поверхностей Ферми методом Харрисона для реальных металлов. Рассмотрим трехвалентный металл, имеющий ГЦК-решетку с периодом a . Примером такого металла может служить алюминий.

Первая зона Бриллюэна для ГЦК-решетки является кубооктаэдром (см. § 2 гл. 2, рис. 75). Кубооктаэдр представляет собой тело, ограниченное шестью шестиугольными и восемью квадратными гранями. Семейства эквидистантных атомных плоскостей,

породившие шестиугольные грани зоны Бриллюэна, — это семейства плоскостей, перпендикулярных пространственным диагоналям элементарного куба решетки кристалла. Они отстоят друг от друга на расстояние $a/\sqrt{3}$ и образуют угол с плоскостью (x, y) , равный $\arccos(1/\sqrt{3})$. Следовательно, шестиугольные грани зоны Бриллюэна в p -пространстве отстоят на $\sqrt{3}\pi h/a$ от начала координат и образуют такой же угол с плоскостью (p_x, p_y) .

Семейства плоскостей, породившие квадратные грани зоны Бриллюэна, являются семействами плоскостей, перпендикулярных осям x , y и z и отстоящих друг от друга на расстоянии $a/2$. Следовательно, квадратные грани зоны Бриллюэна в p -пространстве отстоят на $2\pi h/a$ от начала координат и перпендикулярны осям p_x , p_y и p_z .

Для наглядности изобразим сечения кубооктаэдра двумя вертикальными плоскостями: координатной плоскостью, например (p_x, p_z) (рис. 101), и плоскостью, проходящей через ось p_z и биссектрису p' координатного угла в плоскости (p_x, p_y) (диагональной плоскостью) (рис. 102).

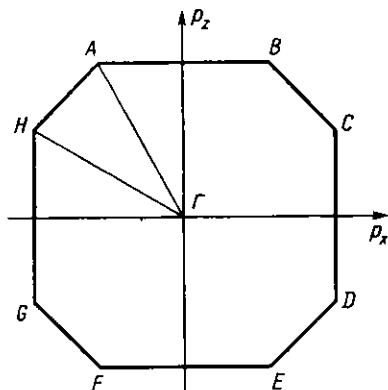


Рис. 101

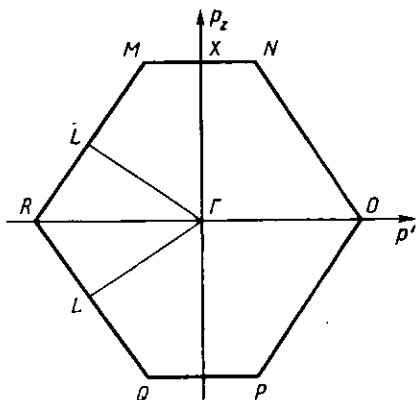


Рис. 102

В силу симметрии кубооктаэдра сечения любой из координатных плоскостей совпадают между собой, как совпадают между собой и все сечения любой диагональной плоскостью, проходящей через оси p_x , p_y или p_z . На рис. 101 прямые AB , CD , EF и GH представляют собой диагонали четырех квадратных граней: двух горизонтальных и двух боковых (вертикальных), а прямые BC , DE , FG и HA — стороны четырех шестиугольников. Поскольку сторона квадрата равна по длине стороне шестигранника, то, обозначая ее через d , можно записать

$$AB=CD=EF=GH=\sqrt{2} \cdot d,$$

$$BC=DE=FG=HA=d.$$

На рис. 102 прямые MN и QP представляют собой линии пересечения квадратных граней с плоскостью, проходящей через их центры и параллельной сторонам квадрата $MN=QP=d$. Прямые RM, NO, OP и QR являются линиями пересечения шестиугольников с плоскостью, проходящей через их центры и перпендикулярной их горизонтальным сторонам (рис. 103). Очевидно, $RM=NO=OP=QR=\sqrt{3}\cdot d$. Точки R и O суть не что иное, как следы сторон, общих для двух соседних шестиугольных граней. Расположение на кубооктаэдре характерных точек сечений показано на рис. 104.

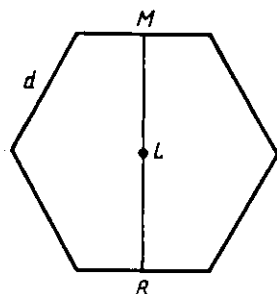


Рис. 103

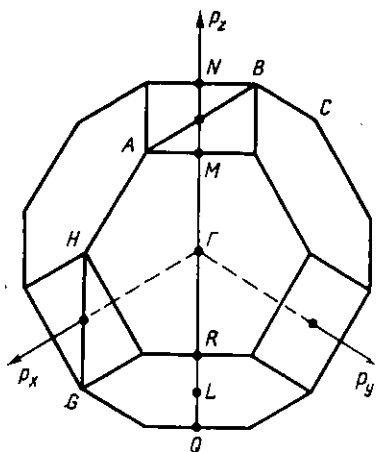


Рис. 104

Зная расстояние $\Gamma L = \sqrt{3}\pi\hbar/a$ в p -пространстве, легко показать, что длина стороны d равна $\sqrt{2}\pi\hbar/a$, а $RL = \frac{\sqrt{3}}{2}d$. На основании рис. 101 и 102 можно показать, что расстояние от начала координат до любой вершины кубооктаэдра, равное, например, AG (см. рис. 101) $\simeq 2,24 \frac{\pi\hbar}{a}$, а расстояние ΓR от начала координат до стороны, общей для двух шестиугольных граней (см. рис. 104), $\simeq 2,12 \frac{\pi\hbar}{a}$. Объем кубооктаэдра $V_p = 8\sqrt{2}d^3$, или

$$V_p = 4 \left(\frac{2\pi\hbar}{a} \right)^3.$$

Для вычисления радиуса ρ_F сферы Харрисона воспользуемся формулой (2.22). Для валентности $z=3$

$$\rho_F = \left(\frac{9}{2\pi} \right)^{1/3} \frac{2\pi\hbar}{a} \simeq 2,26 \frac{\pi\hbar}{a}. \quad (2.30)$$

Полученное значение радиуса ρ_F превосходит расстояния до вер-

шин 1-й зоны Бриллюэна. Это означает, что 1-я энергетическая зона трехвалентного металла с ГЦК-решеткой целиком заполнена электронами.

Для построения изоэнергетической поверхности во 2-й и 3-й зоне воспользуемся сечениями системы повторяющихся зон координатной и диагональной плоскостями (рис. 105 и 106). Поскольку радиус ρ_F сферы Харрисона ненамного превосходит расстояния от начала координат до граничных точек зоны, сферы, проведенные из центров соседних зон, проходят внутри центральной зоны, отрезая от нее линзообразные (в виде плоско-выпуклых линз) объемы, прилегающие к ее граням.

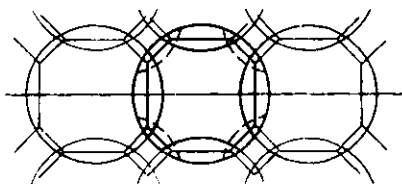


Рис. 105

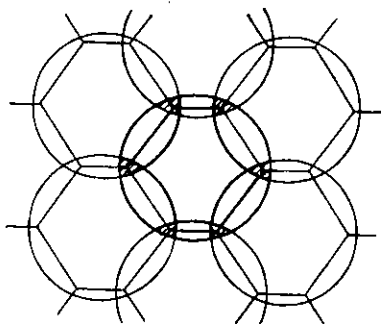


Рис. 106

Оставшееся внутри центральной зоны пустое пространство напоминает кубоктаэдр, но с вогнутыми внутрь гранями и ребрами. Это пространство принадлежит одной центральной сфере Харрисона. Ограничивающая его закрытая односвязная изоэнергетическая поверхность является дырочной и принадлежит 2-й энергетической зоне. Общий вид этой поверхности изображен на рис. 107. На рис. 106 заштрихованы сечения тех объемов, которые принадлежат сразу трем сферам. Они имеют вид треугольных «трубок» переменного сечения, расположенных вдоль всех ребер кубоктаэдра. К концам ребер «трубки» сужаются. Поверхность этих «трубок» представляет собой электронную поверхность в третьей энергетической зоне (рис. 108).

В нулевом приближении ($|V_{эф}|=0$) «трубки» на ребрах, выходящих из каждой вершины кубоктаэдра, соединены друг с другом. Сеть «трубок» образует поэтому в r -пространстве сложную разветвленную систему. Поскольку объем каждой «трубки» сравнительно невелик, необходимо рассмотреть вопрос о том, какие изменения претерпевают отдельные части поверхности Ферми, построенной в нулевом приближении, при переходе к конечному значению эффективного потенциала, а также при его последующем увеличении. Очевидно, эти изменения наиболее существенны для тех частей поверхности Ферми, которые ограничивают малые объемы.

При $|V_{эф}| \neq 0$ форма поверхности Ферми меняется таким образом, что отдельные куски сферы Харрисона, пересекавшие в нулевом приближении плоскости разрыва энергии под произвольными углами, начинают пересекать эти плоскости под прямым углом. Такое преобразование становится понятным из сравнения рис. 92 и 93, а также рис. 96 и 97.

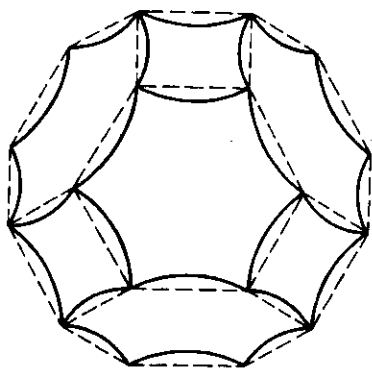


Рис. 107

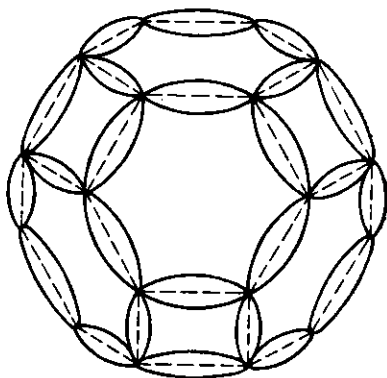


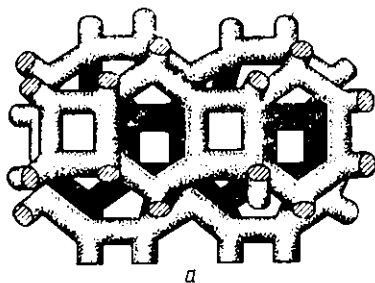
Рис. 108

При увеличении $|V_{эф}|$ электронные и дырочная поверхности в зонах уменьшаются. Причина такого изменения изоэнергетических поверхностей заключается в том, что электронные поверхности всегда расположены в зонах с большими номерами, чем дырочные. Это особенно наглядно видно в модели расширенных зон (см., например, рис. 97). В приведенном примере электронные поверхности строятся из кусков первоначальной сферы Харрисона, расположенных в 3-й и 4-й зоне, а дырочные — из кусков, расположенных во 2-й зоне. Поэтому электронные зоны отделены от дырочных дополнительными плоскостями, на которых энергия испытывает разрыв. При увеличении $|V_{эф}|$ величина разрывов энергии растет, в результате чего быстрее заполняются электронами энергетические зоны с меньшими номерами и объем незаполненных углов в этих зонах уменьшается. Такой же результат еще более наглядно можно получить, рассматривая рис. 84.

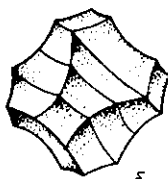
Поскольку общий объем в p -пространстве, заполненный электронами, измениться не может, то при увеличении $|V_{эф}|$ происходит лишь перераспределение электронов между зонами: электроны из зон с большим номером (электронные) перетекают в зоны (или зону) с меньшими номерами (дырочные). В результате этого объем, ограниченный изоэнергетическими поверхностями в электронных зонах, уменьшается, и одновременно уменьшается объем не заполненного электронами пространства в дырочной зоне, т. е. объем, ограниченный изоэнергетической дырочной поверхностью. При достаточно большом значении $|V_{эф}|$ малые

электронные поверхности в зонах могут разорваться на отдельные меньшие куски или совсем исчезнуть. Например, узкие перемычки у электронной изоэнергетической поверхности алюминия (см. рис. 108) могут разорваться при определенном значении $|V_{эф}|$ вблизи вершин кубооктаэдра. При этом замкнутая сеть «трубок» перейдет в отдельные, изолированные друг от друга, вытянутые вдоль каждого ребра «булочки».

Посмотрим теперь, что будет происходить, если при неизменном значении $|V_{эф}|$ изменять число электронов. При увеличении числа электронов (с ростом p_F) поперечное сечение электронных «трубок» в 3-й зоне должно увеличиваться, а размер дырочной поверхности во 2-й зоне должен уменьшаться. Это можно наглядно проследить при переходе от 2-валентного металла с ГЦК-решеткой к 4-валентному, примером которого служит свинец. Электронная поверхность свинца в 3-й зоне является открытой и состоит из толстых трубок вокруг ребер кубооктаэдров, пронизывающих все p -пространство. Часть такой поверхности изображена на рис. 109, а. Заметно меньшая по сравнению с соответствующей поверхностью у алюминия дырочная поверхность свинца во 2-й зоне показана на рис. 109, б.



а



б

Рис. 109

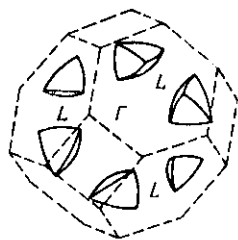


Рис. 110

Электронная часть поверхности Ферми у 3-валентного металла с ГЦК-решеткой не исчерпывается поверхностью в 3-й зоне. Тщательное построение показывает, что вокруг вершин квадратных граней кубооктаэдра (вокруг точек A , B , C и т. п. на рис. 104) расположены небольшие области, которые принадлежат одновременно четырем сферам Харрисона. Эти области, напоминающие по своей форме тетраэдры, ограничены электронной поверхностью в четвертой энергетической зоне. Их объем чрезвычайно мал по сравнению с объемом 1-й зоны Бриллюэна.

При переходе к конечному значению эффективного потенциала электронные поверхности в 4-й зоне еще более уменьшаются и могут совершенно исчезнуть. В случае 4-валентного металла эти поверхности становятся значительно большими. Они сохраняются при значении $|V_{эф}|$, соответствующем реальному металлу.

На рис. 110 показаны электронные поверхности в четвертой зоне для 4-валентного металла с ГЦК-решеткой при $|V_{эф}|=0$. Для наглядности эти поверхности смещены на половину расстояния между центрами противоположных гексагональных граней 1-й зоны Бриллюэна в одном из направлений типа GL (см. рис. 104).

§ 7. ОБЩАЯ СХЕМА ПОСТРОЕНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ ФЕРМИ. КЛАССИФИКАЦИЯ ТОПОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТЕЙ ФЕРМИ

В предыдущих параграфах были рассмотрены различные методы построения поверхностей разрыва энергии и изоэнергетических поверхностей в фазовом пространстве. На их основе можно сформулировать удобную схему построения поверхности Ферми для данного металла. Эта схема состоит из четырех последовательных операций:

1. Для заданной решетки металла строится обратная решетка.
2. Около каждого узла обратной решетки строится элементарная ячейка методом Вигнера—Зейтца. Изменением масштаба осей в $2\pi\hbar$ раз осуществляется переход к фазовому пространству, заполненному периодически повторяющимися первыми зонами Бриллюэна.
3. Исходя из параметров зоны Бриллюэна и валентности металла определяется радиус p_F сферы Харрисона. Вокруг центров периодически повторяющихся зон проводятся сферы радиуса p_F .
4. Изоэнергетические поверхности, образовавшиеся в результате пересечения сфер Харрисона, классифицируются по правилам, сформулированным в гл. 2, § 6. При этом определяются тип поверхности (электронная или дырочная), ее форма и размеры, а также номер энергетической зоны, к которой она относится.

Проиллюстрируем схему построения поверхности Ферми на примере одновалентного металла с простой кубической решеткой.

Векторы основных трансляций обратной решетки перпендикулярны трем семействам эквивалентных эквидистантных атомных плоскостей с периодом a . Элементарная ячейка обратной решетки представляет собой куб со стороной $1/a$. Примем один из узлов обратной решетки за начало координат и соединим его прямыми с ближайшими узлами. Таких прямых длиной $1/a$, очевидно, шесть. Разделим эти прямые пополам и через их середины проведем перпендикулярные им плоскости. В результате образуется куб со стороной $1/a$. Изменим масштаб пространства обратной решетки в $2\pi\hbar$ раз. Построенный куб становится первой зоной Бриллюэна. Она симметрично расположена около выбранного начала координат. Объем зоны (в p -пространстве) равен $\left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^3$. Радиус сферы Харрисона (2.22):

$$p_F = \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/3} \left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right) \simeq 0,986 \frac{\pi\hbar}{a}. \quad (2.31)$$

Поскольку кратчайшее расстояние от начала координат до границ зоны Бриллюэна равно $\pi\hbar/a$, сфера Харрисона почти касается границ зоны. Проведем сферы радиусом ρ_F вокруг центров периодически повторяющихся первых зон Бриллюэна и рассмотрим картину в плоскости (p_x, p_y) (рис. 111). Точки здесь обозначают узлы обратной решетки. Выделена одна из ячеек обратной решетки с центром в точке A , принятой за начало координат в обратном пространстве.

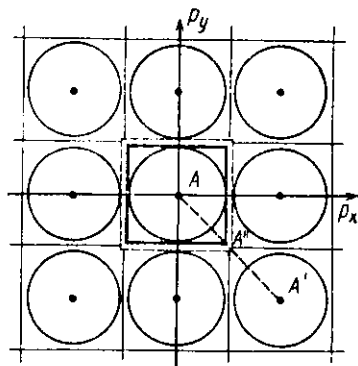


Рис. 111

Если учесть, что эффективный потенциал $|V_{\text{эф}}|$ не равен нулю, то сферы Харрисона должны «присосаться» к центрам граней зоны Бриллюэна. Картины в плоскостях (p_x, p_y) , (p_x, p_z) и (p_y, p_z) , очевидно, аналогичны друг другу. Образовавшаяся в первой зоне изоэнергетическая поверхность проходит через все p -пространство. Она состоит из сфер, сросшихся в направлениях осей p_x , p_y и p_z . Поверхность такого типа в зарубежной литературе получила название «монстр» (чудовище) (рис. 112).

Вторая и следующие энергетические зоны в рассмотренном случае не содержат электронов.

Для двухвалентного металла с такой же кристаллической решеткой радиус ρ_F сферы Харрисона становится в $2^{1/3} \approx 1,26$ раза больше. Он приблизительно равен $1,24 \frac{\pi\hbar}{a}$ и превосходит кратчайшее расстояние до границы зоны Бриллюэна (рис. 113). Обратим внимание на то, что в этом случае возможны два способа классификации образовавшихся изоэнергетических поверхностей.

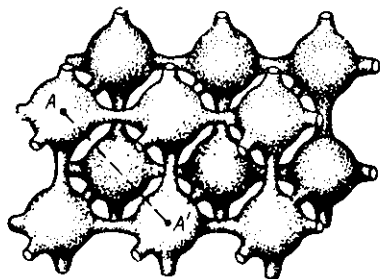


Рис. 112

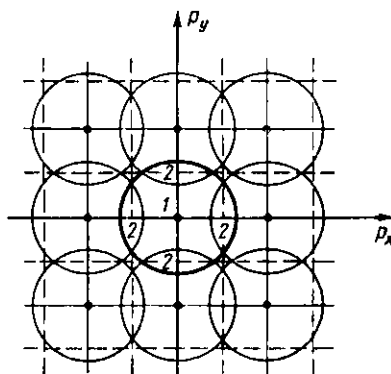


Рис. 113

С одной стороны, можно выделить области, принадлежащие одновременно одной и двум сферам. Эти области, обозначенные на рис. 113 соответственно цифрами 1 и 2, образуют изоэнергетическую поверхность в первой зоне. Внутренний объем этой поверхности заполнен электронами, и поэтому номер зоны, к которой она относится, определяется по правилам для электронных изоэнергетических поверхностей (см. § 6 гл. 2). Изоэнергетическая поверхность, ограничивающая объемы 1 и 2, представляет собой тот же «монстр», но со значительно более толстыми перемычками («шейками») между отдельными сферами. Сечение этой поверхности плоскостью (ρ_x, ρ_y) показано на рис. 114.

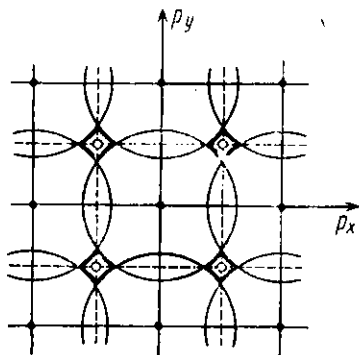


Рис. 114

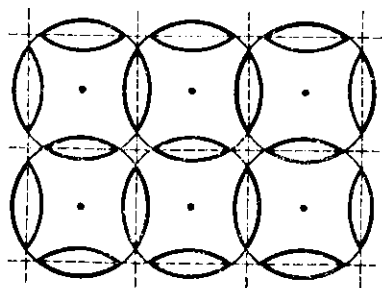


Рис. 115

С другой стороны, видно, что ситуация при переходе от одновалентного к двухвалентному металлу качественно изменилась. Если в первом случае поверхность «монстра» (см. рис. 112), ограничивающая в $\mathbf{p}$ -пространстве область, заполненную электронами, имела участки как положительной, так и отрицательной кривизны, то во втором случае поверхность «монстра» ограничивает только не заполненные электронами области (их сечения обозначены «о» на рис. 114), представляющие собой «кубики» с вогнутыми внутрь гранями. Эти области не принадлежат ни одной сфере, ограничены поверхностями отрицательной кривизны и по принятой классификации должны быть отнесены к первой дырочной зоне. Поэтому фактически 1-я зона у двухвалентного металла с простой кубической решеткой — дырочная. Таким образом, «монстр» при увеличении концентрации электронов выражается в дырочную изоэнергетическую поверхность в первой зоне. Однако очевидно, что фактически форма изоэнергетической поверхности в обоих случаях одна и та же.

Области, принадлежащие одновременно двум сферам (их сечения обозначены цифрой 2 на рис. 113), образуют электронную поверхность во 2-й зоне. Она состоит из трех изолированных замкнутых «карманов», напоминающих чечевицы. Каждая «чечевица»

ца» образуется из двух половинок на противоположных гранях зоны. Сечение плоскостью (p_x, p_y) поверхности во 2-й зоне показано на рис. 115.

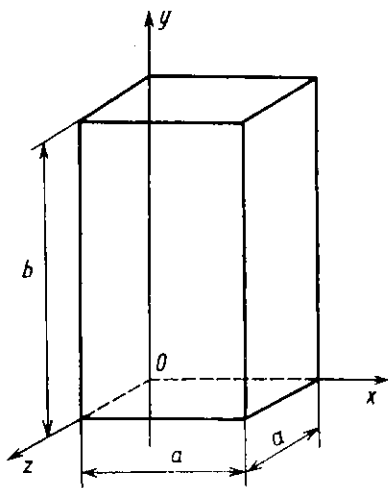


Рис. 116

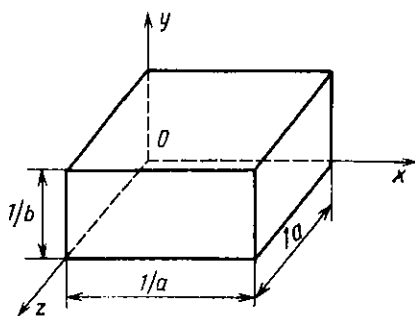


Рис. 117

В заключение рассмотрим одновалентный металл с решеткой, элементарная ячейка которой имеет форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 116). Векторы обратной решетки равны

$$|\mathbf{a}_x^*| = 1/a; \quad |\mathbf{a}_y^*| = 1/b; \quad |\mathbf{a}_z^*| = 1/a.$$

Ячейка обратной решетки изображена на рис. 117.

Первая зона Бриллюэна, построенная по методу Вигнера—Зейтца, представляет собой параллелепипед со сторонами $2\pi\hbar/a$, $2\pi\hbar/b$, $2\pi\hbar/a$, объем которого равен $V_p = \frac{(2\pi\hbar)^3}{a^2b}$ (рис. 118).

Радиус сферы Харрисона (при $z=1$) равен

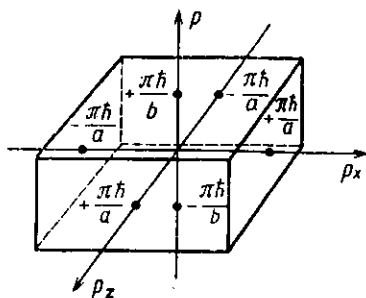


Рис. 118

$$\rho_F = \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{1/3} \frac{2\pi\hbar}{(a^2b)^{1/3}} \simeq 0,984 \frac{\pi\hbar}{(a^2b)^{1/3}}. \quad (2.32)$$

При $\frac{a}{b} < \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \simeq 0,98$ выполняется неравенство

$$\frac{\pi\hbar}{a} > \rho_F > \frac{\pi\hbar}{b}.$$

В этом случае сфера Харрисона пересекает верхнюю и нижнюю грани зоны Бриллюэна, но не достигает боковых.

Проведем сферы Харрисона из центров всех периодически продолжающихся первых зон Бриллюэна. Сечение сфер плоскостью (p_x, p_y) показано на рис. 119. На рис. 120 приведены се-

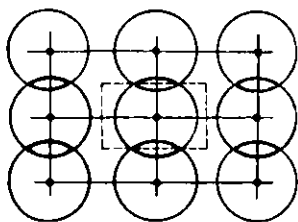
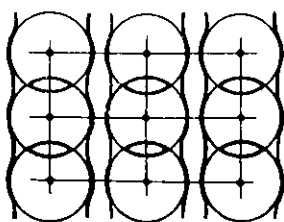
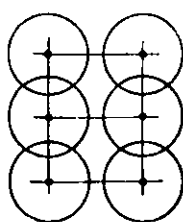


Рис. 119



а



б

Рис. 120

чения плоскостью (p_x, p_y) изоэнергетических поверхностей в первой и второй зоне. В данном случае поверхность типа «монстр» в 1-й зоне перешла в поверхность типа «гофрированный цилиндр» (рис. 121).



Рис. 121

Рассмотренные примеры различных поверхностей Ферми показывают, что по своей топологии они делятся на два основных класса — на закрытые и открытые. Поверхность называется закрытой, если линии пересечения ее с любыми плоскостями являются замкнутыми.

Примером могут служить изоэнергетические поверхности во второй зоне на рис. 115 и 120, б. Поверхность называется открытой, если существует хотя бы одно плоское сечение, которое дает незамкнутую кривую. Примерами таких поверхностей служат «монстр» (см. рис. 112, 114) и «гофрированный цилиндр» (см. рис. 120, а, 121).

Выводы

1. Энергетический спектр электронов в металле состоит из нескольких энергетических зон (полос). Это означает, что одному значению квазиимпульса электрона могут соответствовать различные энергетические состояния.

2. Свойства электронов в каждой зоне определяются видом изоэнергетической поверхности в этой зоне.

3. В металле могут быть как открытые, так и закрытые изоэнергетические поверхности.

4. Концентрации носителей тока в зонах могут резко отличаться друг от друга.

Концентрация n_i носителей тока в i -й зоне определяется формулой

$$n_i = \frac{2\Delta_i}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (2.33)$$

где Δ_i — суммарный объем p -пространства, ограниченный всеми изоэнергетическими поверхностями в i -й зоне.

Если же поверхность Ферми открытая, то под Δ_i подразумевается объем, ограниченный этой поверхностью в пределах одной зоны Бриллюэна (частью границ объема являются граничные плоскости зоны Бриллюэна).

5. Объемы, ограниченные поверхностями Ферми в разных зонах, могут перекрываться между собой, однако индивидуальность каждой зоны полностью сохраняется.

6. На основании теоремы о непересекаемости термов изоэнергетические поверхности не могут пересекаться, но могут иметь только общие точки.

7. Во всех физических процессах участвуют электроны, расположенные на всей совокупности изоэнергетических поверхностей.

Глава 3

ДИНАМИКА КВАЗИЧАСТИЦ

§ 1. ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ. ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА

Движение электрона в решетке определяется его законом дисперсии $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$, который формируется под влиянием внутрикристаллических сил. Движение электронов во внешних (по отношению к металлу) электрических и магнитных полях мы будем рассматривать в рамках квазиклассического описания. Как известно из квантовой механики, такое рассмотрение возможно только тогда, когда длина λ_B волны де Бройля электрона значительно меньше характерных размеров электронной траектории. Покажем, что это условие всегда выполняется при взаимодействии электронов в металле с внешними полями.

Прежде всего заметим, что во всех практически интересных случаях внешние электрические и магнитные поля, которые не приводят к разрушению кристаллической решетки металла, не могут изменить существенным образом структуру самого металла. Это означает, что создаваемые ими силы малы по сравнению с внутриатомными или внутрикристаллическими, а сами поля слабо изменяются на расстояниях порядка постоянной решетки a и являются достаточно плавными и однородными. Траектория электронов в таких полях обычно значительно превосходит размеры элементарной ячейки кристалла.

С другой стороны, как было показано выше, во взаимодейст-

вии с внешними полями в металле могут участвовать только электроны, расположенные в узком слое вблизи поверхности Ферми. Волновой вектор этих электронов имеет величину порядка размеров зоны Бриллюэна, а длина волны де Бройля λ_B порядка a .

Таким образом, взаимодействие фермиевских электронов в металле с внешними полями может быть описано в квазиклассическом приближении.

Напомним, что движение классической частицы описывается с помощью функции Гамильтона $\mathcal{H}(\mathcal{P}, \mathbf{r}) = \varepsilon(\mathcal{P}) + W(\mathbf{r})$, где $\varepsilon(\mathcal{P})$ — кинетическая энергия частицы, а $W(\mathbf{r})$ — ее потенциальная энергия в поле внешних сил. Уравнения движения частицы в шестимерном пространстве координат $\mathbf{r}$ и импульсов $\mathcal{P}$ имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{P}}{dt} &= -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathcal{P}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} = -\frac{\partial W(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}(\mathcal{P}, \mathbf{r})}{\partial \mathcal{P}} = \frac{\partial \varepsilon(\mathcal{P})}{\partial \mathcal{P}}. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Первое из этих уравнений определяет изменение скорости классической частицы $\frac{d\mathcal{P}}{dt} = m_0 \frac{d\mathbf{v}}{dt}$ под действием внешних сил $-\frac{\partial W(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}$ и является выражением второго закона Ньютона.

Второе уравнение определяет скорость частицы.

Движение электрона в решетке в квазиклассическом приближении также удобно описывать с помощью уравнений, аналогичных классическим уравнениям (3.1). Найдем эти уравнения и определим, как должен выглядеть аналог функции Гамильтона для электрона в кристаллической решетке.

В § 6 гл. 1 было показано, что энергия ε электрона в идеальной решетке является функцией квазиимпульса $\mathbf{p}$, который сохраняется при движении в пространстве периодического потенциала. Изменение квазиимпульса во времени под действием внешних сил описывается уравнением (1.23). Это уравнение представляет собой выражение второго закона Ньютона для электрона в решетке. Оно аналогично первому уравнению классической системы (3.1).

Для того чтобы найти аналог второго уравнения системы (3.1) и определить вид квазиклассической функции Гамильтона для электрона в решетке, необходимо найти выражение для скорости электрона. Можно показать, что оператор скорости в представлении квазиимпульса имеет вид оператора умножения на производную энергии по квазиимпульсу. Таким образом, собственное значение скорости электрона (или просто скорость электрона) равно производной его энергии по квазиимпульсу:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}. \quad (3.2)$$

Это выражение аналогично второму уравнению Гамильтона в системе (3.1) и служит определением скорости.

Выражение (3.2) сохраняет свой вид и в том случае, если кристалл помещен в поле внешних сил с потенциальной энергией $W(\mathbf{r})$, которая не является периодической функцией с периодом решетки.

Скорость электрона в решетке полностью определяется законом дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ с помощью выражения (3.2). Для произвольного закона дисперсии между квазиимпульсом $\mathbf{p}$ и скоростью $\mathbf{v}$ электрона не существует простой пропорциональности $\mathbf{p} \sim \mathbf{v}$ и вектор $\mathbf{v}$ в общем случае не коллинеарен вектору $\mathbf{p}$.

Квазиклассические уравнения, описывающие движение электрона в решетке:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{p}}{dt} &= -\frac{\partial W(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \mathbf{v} = \frac{\partial \epsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}},\end{aligned}$$

могут быть записаны как уравнения Гамильтона

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{p}}{dt} &= -\frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}, \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\partial \mathbf{p}},\end{aligned}\tag{3.3}$$

если квазиклассическую функцию Гамильтона $\mathcal{H}$ для электрона в решетке записать в виде суммы

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \epsilon(\mathbf{p}) + W(\mathbf{r}),\tag{3.4}$$

где $W(\mathbf{r})$ — потенциал внешних по отношению к решетке сил. Обратим внимание на то, что функция Гамильтона $\mathcal{H}$ для электрона в решетке зависит от координат и квазиимпульсов.

Используя выражение для скорости (3.2) и учитывая, что изменение во времени любого оператора определяется его коммутатором с оператором Гамильтона, можно найти оператор ускорения $\hat{\mathbf{a}}$. При отсутствии внешних сил оператор скорости коммутирует с оператором Гамильтона $\mathcal{H}_0 = \epsilon(\mathbf{p})$ и оператор ускорения равен нулю:

$$\hat{\mathbf{a}} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{\partial \epsilon(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \epsilon(\mathbf{p}) \right] = 0.$$

В этом случае скорость электрона, как и его квазиимпульс, является интегралом движения. Найдем теперь ускорение электрона в поле внешних сил $\mathbf{F}_{\text{внеш}} = -\frac{\partial W}{\partial \mathbf{r}}$. Согласно (3.2) i -я компонента a_i вектора ускорения имеет вид

$$a_i = \frac{dv_i}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial e}{\partial p_i} \right) = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{de}{dt} \right) = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{\partial e}{\partial p} \frac{dp}{dt} \right) = \\ = \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j} \frac{dp_j}{dt} + \frac{\partial e}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{dp_j}{dt} \right) \right) = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 e}{\partial p_i \partial p_j} \frac{dp_j}{dt},$$

поскольку

$$\frac{\partial}{\partial p_j} \left(\frac{dp_j}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \frac{\partial p_j}{\partial p_i} = \frac{d}{dt} \delta_{ij} = 0.$$

Производная квазимпульса по времени определяется полем внешних сил (см. (1.23)). Таким образом, можно записать

$$a_i = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 e(p)}{\partial p_i \partial p_j} \cdot (F_{\text{внешн}})_j. \quad (3.5)$$

Выражение (3.5) связывает ускорение электрона a с внешней силой $F_{\text{внешн}} = -\frac{\partial W}{\partial r}$.

Производные $\frac{\partial^2 e(p)}{\partial p_i \partial p_j}$, имеющие размерность обратной массы, являются компонентами симметричного тензора второго ранга. Этот тензор получил название тензора обратных эффективных масс. Обозначая компоненты обратного ему тензора через m_{ij}^* , можно записать

$$\sum_{j=1}^3 m_{ij}^* \frac{dv_j}{dt} = \sum_{j=1}^3 m_{ij}^* a_j = (F_{\text{внешн}})_i. \quad (3.6)$$

Тензор m_{ij}^* называется тензором эффективных масс.

Уравнение (3.6) по форме совпадает с уравнением движения частицы в свободном пространстве под действием внешних сил. Однако оно имеет ряд отличительных особенностей, на которые необходимо обратить внимание.

Во-первых, вектор ускорения a выражается через вектор внешней силы $F_{\text{внешн}}$ при помощи тензора обратных эффективных масс $(m^{*-1})_{ij} = \frac{\partial^2 e(p)}{\partial p_i \partial p_j}$. В общем случае вектор a не совпадает по направлению с вектором внешней силы $F_{\text{внешн}}$.

Во-вторых, только внешняя сила сообщает электрону ускорение. Внутренние силы, или силы взаимодействия электрона с ре-

) Если детерминант матрицы $\left\{ \frac{\partial^2 e(p)}{\partial p_i \partial p_j} \right\}$ в некоторой точке пространства квазимпульсов равен нулю, то обратный тензор m_{ij}^ в этой точке не существует.

шеткой, участвуют в формировании закона дисперсии и, таким образом, через тензор эффективной массы определяют реакцию электрона на действие внешних сил. При помощи уравнения (3.6) неизвестные внутренние силы, действующие на электрон со стороны решетки, включены в определение тензора эффективных масс.

Заметим, что в системе главных осей тензора m_{ij}^* , в которых его матрица является диагональной, компоненты m_{ij}^* имеют одинаковый знак. Три главные компоненты тензора m_{ij}^* в таких случаях становятся важными динамическими характеристиками электрона в кристалле, определяющими характер его движения во внешних электрических и магнитных полях.

Зная компоненты тензора эффективных масс, можно описать движение электрона под действием одних только внешних сил. При этом многие формулы, полученные для электрона в свободном пространстве, оказываются применимыми для описания поведения электрона в решетке при замене массы свободного электрона на соответствующую компоненту (или комбинацию компонент) тензора эффективных масс. При использовании эффективной массы необходимо, однако, учитывать, что аналогия между поведением электрона в решетке и поведением электрона в свободном пространстве, полезная благодаря своей наглядности, имеет ограниченную область применимости. Использование тензора эффективных масс в различных формулах требует всякий раз предварительного обоснования.

Использование эффективных масс в качестве физических параметров, характеризующих электрон в металле, целесообразно в тех областях p -пространства, в которых главные компоненты тензора m_{ij}^* практически не зависят от p и являются постоянными (или приближенно постоянными) величинами. Такие условия, например, выполняются в окрестностях точек p_0 , в которых энергия электрона $\varepsilon(p_0)$ достигает относительного максимума или минимума.

Обозначим через ε_0 значение энергии электрона $\varepsilon(p_0)$ в точке экстремума $p=p_0$. В окрестности этой точки $\varepsilon(p)$ можно разложить в ряд по степеням $(p-p_0)_i$. Поскольку в экстремальных точках $\frac{\partial \varepsilon}{\partial p_i} = 0$, то члены первой степени по $(p-p_0)_i$ в разложении будут отсутствовать. С точностью до квадратичных членов разложение имеет вид

$$\varepsilon(p) = \varepsilon(p_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} (p_i - p_{0i}) (p_j - p_{0j}), \quad (3.7)$$

где

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_j} \text{ при } p = p_0.$$

Переходя к системе координат, связанной с главными осями тензора α_{ij} , получим

$$\epsilon(\mathbf{p}) - \epsilon_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \alpha_{ii} (p_i - p_{0i})^2. \quad (3.8)$$

В окрестности точки $\mathbf{p}_0$, где можно ограничиться квадратичными по $(\mathbf{p} - \mathbf{p}_{0i})$ членами, компоненты тензора эффективной массы постоянны и равны

$$m_{ii}^* = \frac{1}{\alpha_{ii}} = \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_i^2} \bigg|_{\mathbf{p}=\mathbf{p}_0} \right)^{-1}. \quad (3.9)$$

Величины m_{ii}^* положительны около точки минимума энергии и отрицательны около точки максимума. В первом случае электрон в решетке ведет себя качественно так же, как свободный: в электрическом поле его кинематическая скорость возрастает в направлении действующей силы $-|e|\mathbf{E}$. Во втором случае электрон ускоряется в направлении, обратном по отношению к внешней силе, т. е. ведет себя как частица с положительным зарядом и положительной массой.

Если поместить начало координат $\mathbf{p}$ -пространства в точку $\mathbf{p}_0$ экстремума энергии и отсчитывать энергию ϵ от ϵ_0 , то с точностью до квадратичных членов

$$\epsilon' = \sum_{i=1}^3 \frac{p_i'^2}{2m_{ii}^*},$$

где $\epsilon' = \epsilon - \epsilon_0$ и $p_i' = p_i - p_{0i}$. Полученное выражение представляет собой уравнение трехосного эллипсоида:

$$\frac{p_1'^2}{2m_{11}^* \epsilon'} + \frac{p_2'^2}{2m_{22}^* \epsilon'} + \frac{p_3'^2}{2m_{33}^* \epsilon'} = 1, \quad (3.10)$$

три полуоси которого соответственно равны $\sqrt{2m_{11}^* \epsilon'}$, $\sqrt{2m_{22}^* \epsilon'}$ и $\sqrt{2m_{33}^* \epsilon'}$ (рис. 122).

Таким образом, вблизи экстремальных точек поверхности постоянной энергии $\epsilon = \text{const}$ для электронов в кристалле представляют собой эллипсоидальные поверхности. В частном случае, когда $m_{11}^* = m_{22}^* = m_{33}^* = m$, эллипсоид вырождается в сферу. Компоненты m_{11}^* , m_{22}^* и m_{33}^* определяют эффективные массы электрона при его движении соответственно вдоль осей $\mathbf{p}_1'$, $\mathbf{p}_2'$ и $\mathbf{p}_3'$.

Если квазимпульс $\mathbf{p}$ электрона направлен вдоль единичного вектора $\mathbf{n}$, то его эффективная масса m_n^* пропорциональна квадрату отрезка прямой OA от начала координат O до поверхности

эллипсоида в направлении n (см. рис. 122). Величина m_n^* равна $(OA)^2/2e'$.

Рассмотрим теперь, как будет двигаться электрон в кристалле, если на него наложено постоянное электрическое поле E . Для простоты рассмотрим кристалл с простой кубической решеткой. Пусть электрическое поле направлено вдоль отрицательного на-

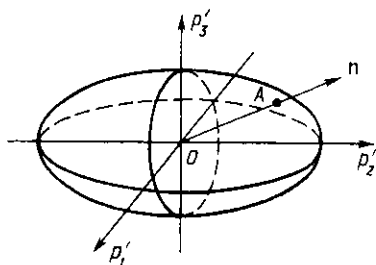


Рис. 122

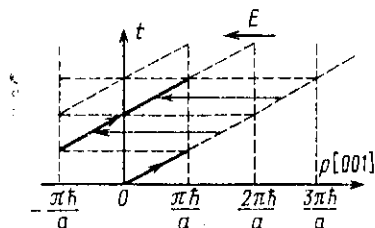


Рис. 123

правления одной из главных кристаллографических осей, например $[001]$. Проведем мысленный опыт, в котором рассматривается только один электрон в решетке кристалла. Предположим, что до включения электрического поля E кинетическая энергия и квазиимпульс электрона были равны нулю. Таким образом, в пространстве квазиимпульсов электрону соответствовала точка, расположенная в центре зоны Бриллюэна. Пусть в некоторый момент времени $t=0$ включается электрическое поле E . Поскольку в постоянном электрическом поле на электрон действует внешняя сила $-|e|E$, то квазиимпульс электрона в соответствии с уравнением (1.23) будет линейно возрастающей функцией времени: $|p| = |e|Et$.

Если бы электрон был свободной частицей, то в постоянном электрическом поле его импульс возрастал бы линейно во времени, как показано на рис. 123 прямой пунктирной линией, идущей из начала координат. В кристалле ситуация качественно меняется. Как уже отмечалось, наличие периодического потенциала решетки приводит к тому, что квазиимпульс электрона, который также изменяется линейно во времени под действием внешней силы, определяется с точностью до величины $\frac{2\pi\hbar}{a}n$. Это означает, что отрезки

$$\left(-\frac{\pi\hbar}{a} \div 0\right) \text{ и } \left(\frac{\pi\hbar}{a} \div \frac{2\pi\hbar}{a}\right); \quad \left(0 \div \frac{\pi\hbar}{a}\right) \text{ и } \left(\frac{2\pi\hbar}{a} \div \frac{3\pi\hbar}{a}\right)$$

содержат физически эквивалентные значения квазиимпульса электрона. Поэтому движение электрона в интервале $\left(\frac{\pi\hbar}{a} \div \frac{2\pi\hbar}{a}\right)$ эквивалентно его движению в интервале $\left(-\frac{\pi\hbar}{a} \div 0\right)$,

а движение в интервале $\left(\frac{2\pi\hbar}{a} \div \frac{3\pi\hbar}{a}\right)$ — движению в интервале $\left(0 \div \frac{\pi\hbar}{a}\right)$ и т. д.

Транслируя отрезки $\left(\frac{\pi\hbar}{a} + \frac{2\pi\hbar}{a}\right)$ и $\left(\frac{2\pi\hbar}{a} \div \frac{3\pi\hbar}{a}\right)$ на величину $2\pi\hbar/a$ влево, можно установить, что вектор квазиимпульса электрона периодически изменяется во времени от значения $-\pi\hbar/a$ до значения $+\pi\hbar/a$. Каждый раз, когда электрон достигает границы $p = +\pi\hbar/a$ зоны Бриллюэна, его квазиимпульс скачком меняется на обратный: электрон зеркально отражается от границы зоны.

Совершенно иначе меняется скорость электрона. Эта величина $v = \frac{de}{dp}$, как и энергия электрона, является периодической функцией квазиимпульса с периодом $2\pi\hbar/a$. Формально зависи-

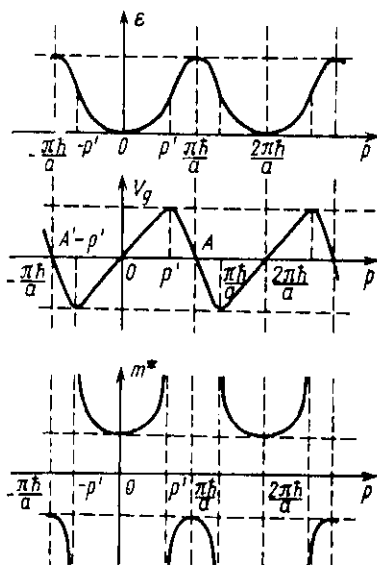


Рис. 124

мость скорости от p может быть получена дифференцированием графика зависимости энергии от p (рис. 124).

В рассматриваемой задаче, где поле E ориентировано по главной оси кристалла, скорость v электрона всегда коллинеарна квазиимпульсу p , хотя величина скорости $|v|$ отнюдь не пропорциональна величине $|p|$: по мере приближения $|p|$ к граничному значению $\pi\hbar/a$ скорость электрона стремится к нулю (см. рис. 124).

Положительным значениям квазиимпульса и положительным значениям скорости соответствует движение электрона в направлении действующей силы (вправо), а отрицательным значениям — влево. Таким образом, периодическому движению в p -пространстве точки, изображающей конец вектора квазиимпульса (см. рис. 123), соответствует периодическое движение

электрона в реальном пространстве: при изменении квазиимпульса от 0 до $\pi\hbar/a$ электрон движется вправо, затем квазиимпульс скачком меняется на обратный и при дальнейшем изменении квазиимпульса от $-\pi\hbar/a$ до 0 электрон движется влево и т. д.

Попытаемся объяснить причину такого сложного характера движения электрона в кристалле. Если вначале квазиимпульс электрона мал (электрон находится вблизи центра первой зоны Бриллюэна), то он ведет себя практически как свободный: в

электрическом поле происходит обычное ускорение электрона, при котором его скорость v увеличивается в направлении внешней силы. Однако вместе с этим непрерывно возрастает его импульс $|p|$ (см. (1.23)) и уменьшается длина волны де Бройля λ_B . Электрон не только ускоряется кинематически, но и приближается к границе зоны Бриллюэна в импульсном (фазовом) пространстве.

Приближение к границе приводит к тому, что реакция решетки на электронную волну увеличивается: амплитуда отраженной от решетки волны возрастает. При этом скорость электрона нарастает не так быстро, как нарастала бы скорость свободного электрона, поскольку часть ускоряющей внешней силы идет на преодоление реакции решетки. При дальнейшем увеличении квазиимпульса рост групповой скорости электрона все более замедляется и при некотором значении p' прекращается совсем (см. рис. 124). Скорость электрона в этой точке зоны Бриллюэна достигает максимальной величины.

Дальнейшее увеличение квазиимпульса приводит, при $p > p'$ к тому, что реакция решетки становится больше внешней силы. На этом этапе движения электрона во внешнем поле наиболее эффективно возрастает отраженная от решетки компонента электронной волны. Под действием реакции решетки кинематическая скорость электрона начинает уменьшаться. В этой области электрон продолжает двигаться по инерции в прежнем направлении и тормозится реакцией решетки. На границе зоны Бриллюэна (точка A на рис. 124) импульс достигает величины $p = \pi\hbar/a$, а кинематическая скорость обращается в нуль: $v = \frac{d\epsilon}{dp} = 0$.

При $p = \pi\hbar/a$ квазиимпульс электрона скачком меняет знак: изображающая точка в фазовом пространстве переходит из точки A в точку A' (см. рис. 124). Обе эти точки соответствуют остановке электрона в реальном пространстве.

Одновременно с переходом из точки A в A' меняется направление движения электрона в кристалле — теперь электрон движется влево против ускоряющей внешней силы. В результате этого квазиимпульс электрона уменьшается по абсолютной величине. На отрезке от $-\pi\hbar/a$ до $-p'$ электрон ускоряется в обратном направлении под действием сил реакции решетки: сумма внутренних сил на этом участке превышает силу $|e||E|$, а их направление противоположно вектору внешней силы. По мере удаления электрона от границы зоны Бриллюэна сила реакции решетки уменьшается, и при $p = -p'$ она сравнивается с силой, действующей со стороны электрического поля E . В точке $p = -p'$ абсолютная величина скорости электрона достигает максимума. При $|p| < |p'|$ электрон замедляется под действием силы $|e||E|$, так что его скорость обращается в нуль в центре зоны Бриллюэна при $p = 0$. Это вторая точка остановки электрона в реальном пространстве. В точке $p = 0$ скорость электрона меняет

знак, и он начинает опять ускоряться вправо обычным образом под действием электрического поля E .

Движение электрона в постоянном электрическом поле напоминает движение шарика, падающего на упругую плиту в поле силы тяжести. Падая вниз, шарик ускоряется под действием силы тяжести, и его скорость растет. В момент соприкосновения с поверхностью плиты скорость шарика максимальна. Далее плита начинает упруго деформироваться. Сила реакции со стороны плиты уменьшает скорость шарика до нуля, а затем ускоряет его в противоположном направлении (вверх). Оторвавшись от плиты, шарик замедляется в поле силы тяжести до тех пор, пока не остановится в исходной точке, из которой он начал падение. При отсутствии сил трения колебательное движение шарика вниз и вверх будет продолжаться до бесконечности с постоянной амплитудой.

Движение электрона в постоянном внешнем поле E можно рассмотреть также, исходя из уравнения (3.6), в котором тензор эффективных масс m_{ij}^* формально учитывает действие внутрикристаллических сил на электрон. В рассмотренном выше простом случае векторы p и v коллинеарны. В уравнение (3.6) входит только одна компонента тензора

$$m^* = \left(\frac{\partial^2 e}{\partial p^2} \right)^{-1} = \left(\frac{\partial v}{\partial p} \right)^{-1}.$$

Чтобы получить зависимость m^* от p , достаточно продифференцировать кривую $v(p)$ на рис. 124 и взять обратную величину производной (см. рис. 124). В центральной области зоны Бриллюэна при увеличении квазиимпульса эффективная масса m^* возрастает от значения, близкого к массе m_0 свободного электрона, до плюс бесконечности при $p=p'$. Бесконечное значение m^* означает, что в уравнении (3.6) конечная внешняя сила $|e||E|$ не вызывает больше увеличения скорости электрона (m^* стремится к бесконечности как $1 / \frac{dv}{dt}$ при $\frac{dv}{dt} \rightarrow 0$, так что

произведение $m^* \frac{dv}{dt}$ остается равным внешней силе $|e||E|$). При прохождении через точку p' эффективная масса меняет знак и величину от $+\infty$ до $-\infty$. Отрицательная эффективная масса описывает процесс торможения электрона; при $p > p'$ электрон вместо того, чтобы ускоряться силой $|e||E|$, начинает тормозиться, т. е. ведет себя или как частица с отрицательными зарядом и массой, или же как положительно заряженная частица с положительной массой. Таким образом, движение электрона на отрезке $p' \div A$ можно описать двумя эквивалентными способами: считать, что в точке p' эффективная масса изменила знак и стала отрицательной, или считать, что масса не изменилась, но изменился заряд электрона на положительный.

В точке A' направление движения электрона меняется на обратное, и внешняя сила $|e||E|$ теперь стремится затормозить.

электрон. На самом же деле на отрезке $A' \div p'$ он ускоряется (см. рис. 124), и этот процесс ускорения описывается отрицательной эффективной массой (можно также считать, что при этих значениях квазиимпульса электрон ведет себя как положительно заряженная частица). На отрезке $-p' \div 0$ электрон, двигаясь против ускоряющей внешней силы, тормозится, т. е. ведет себя как обычная отрицательно заряженная частица с положительной массой.

Таким образом, под действием постоянного электрического поля E электрон в кристаллической решетке совершает периодическое движение так, что точка, изображающая конец вектора его квазиимпульса, каждый раз проходит зону Бриллюэна в одном и том же направлении, совпадающем с направлением действующей на электрон силы $-|e|E$. Обратный проход зоны Бриллюэна совершается скачком при отражении электрона от границы.

Мы пришли к парадоксальному заключению о том, что движение электрона в постоянном электрическом поле финитно и циклично: электрон в решетке периодически проходит через одну и ту же точку в кристалле. Такое движение качественно отличается от движения свободного электрона в постоянном электрическом поле, которое является равномерно ускоренным и инфинитным: свободный электрон никогда не возвращается в свою начальную точку.

Заметим, однако, что циклическое движение электрона в электрическом поле практически не наблюдаемо. Объясняется это тем, что длина свободного пробега электрона в металле на много порядков меньше амплитуды колебаний электрона в поле. Чтобы показать это, определим частоту и амплитуду финитного движения. Период колебания определяется временем τ , в течение которого изображающая точка на рис. 124 пробегает отрезок AA' . Из уравнения (1.23) следует, что время τ равно

$$\tau = \int_{-\frac{\pi\hbar}{a}}^{+\frac{\pi\hbar}{a}} \frac{dp}{|e||E|} = \frac{2\pi\hbar}{a|e||E|}. \quad (3.11)$$

Частота колебаний ν_E в электрическом поле составляет

$$\nu_E = \frac{1}{\tau} = \frac{a|e||E|}{2\pi\hbar}. \quad (3.12)$$

Изменение энергии $\epsilon_A - \epsilon_0$ при движении электрона из точки O в точку A равно работе, которую совершает постоянная сила $|e|E$ на пути X между двумя точками остановки в кристалле:

$$\epsilon_A - \epsilon_0 = |e|EX.$$

Отсюда амплитуда колебаний $X = \frac{\epsilon_A - \epsilon_0}{|e|E}$.

Разность $\epsilon_A - \epsilon_0$ является шириной энергетической зоны и составляет в металлах величину порядка нескольких электрон-вольт. При разумных значениях электрического поля $E \sim 10^{-6}$ В/см амплитуда X достигает $\sim 10^6$ см, что в сотни миллионов раз превосходит длину свободного пробега электрона^{*)}. Колебания с такой гигантской амплитудой должны были бы совмещаться с крайне низкой частотой

$$\nu_E = \frac{a |e| E}{2\pi\hbar} \sim 50 \text{ Гц.}$$

При каждом акте рассеяния импульс электрона нерегулярно изменяется. По этой причине не может осуществиться финитное движение по траектории, превосходящей длину свободного пробега. На малых участках пути между последовательными актами рассеяния электрон, естественно, движется поступательно. Мы вновь приходим к парадоксальному заключению, что протекание постоянного тока в металлах обязано рассеянию электронов. Отсутствие рассеяния привело бы не к бесконечному росту электрического тока, как это было бы в свободном пространстве, а к возникновению переменного тока с частотой, зависящей от приложенного электрического поля (близкой к промышленной частоте 50 Гц).

§ 2. ДВИЖЕНИЕ КВАЗИЧАСТИЦ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Движение свободного электрона в постоянном магнитном поле $\mathbf{H}$ в квазиклассическом приближении описывается уравнением

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = - \frac{|e|\hbar}{c} [\mathbf{vH}], \quad (3.13)$$

где $\mathbf{p}$ — классический импульс электрона. Действующая на электрон со стороны магнитного поля $\mathbf{H}$ сила Лоренца $\mathbf{F}_H = \frac{e}{c} [\mathbf{vH}]$ направлена перпендикулярно его скорости $\mathbf{v}$. Поэтому в свободном пространстве электрон движется по спирали вокруг магнитной силовой линии. Радиус его орбиты r_H в проекции на плоскость, перпендикулярную магнитному полю $\mathbf{H}$, равен $\frac{cp_{\perp}}{|e|\hbar H}$, где $p_{\perp}$ — компонента импульса, перпендикулярная магнитному полю. Условие применимости квазиклассического приближения является выполнение неравенства

$$\lambda_B \ll r_H. \quad (3.14)$$

^{*)} Электрическое поле $E \sim 10^{-6}$ В/см соответствует плотности тока в металле $j \sim 10$ А/см при удельном сопротивлении $\rho \sim 10^{-8}$ Ом·см. Численный пример заимствован из книги: И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов. Электронная теория металлов (М.: Наука, 1971).

Поскольку $\lambda_B = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}$, неравенство (3.14) для электрона в свободном пространстве эквивалентно неравенству

$$\hbar\omega_c \ll \frac{p_{\perp}^2}{2m_0} \ll e_F, \quad (3.15)$$

где $\omega_c = \frac{|e|\hbar}{m_0 c}$ — циклотронная частота прецессии электрона.

При движении в кристаллической решетке изменение квазиимпульса электрона определяется действием только внешних сил. Поэтому уравнение движения электрона в металле будет иметь вид, совпадающий с уравнением (3.13), где под p теперь необходимо понимать квазиимпульс электрона.

Умножая обе части уравнения (3.13) скалярно на v и на H , получим два следующих равенства:

$$\left(v \cdot \frac{dp}{dt}\right) = 0 \quad \text{и} \quad \left(H \cdot \frac{dp}{dt}\right) = 0. \quad (3.16)$$

Первое равенство есть не что иное, как закон сохранения энергии. Действительно,

$$v = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \quad \text{и} \quad \left(v \cdot \frac{dp}{dt}\right) = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial p} \cdot \frac{dp}{dt}\right) = \frac{d\varepsilon}{dt} = 0.$$

Энергия ε электрона в квазиклассическом приближении не меняется в магнитном поле, так как сила Лоренца всегда направлена перпендикулярно вектору скорости электрона и не меняет абсолютного значения величины скорости. Отсюда следует, что конец вектора импульса электрона в магнитном поле H движется по изоэнергетической поверхности

$$\varepsilon(p) = \text{const}. \quad (3.17)$$

Разложим вектор $\frac{dp}{dt}$ на две составляющие: $\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\parallel}$ — параллельную H и $\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\perp}$ — перпендикулярную H . Второе из равенств (3.16) означает, что $\left(\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\perp} \cdot H\right) = 0$, т. е.

$$\left|\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\perp}\right| \cdot H = 0 \quad \text{и} \quad \left|\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\parallel}\right| = 0.$$

Отсюда следует, что проекция импульса электрона на направление магнитного поля сохраняется, т. е.

$$p_{\parallel} = \text{const}. \quad (3.18)$$

Соотношения (3.17) и (3.18) описывают траекторию электрона в импульсном пространстве*). Первое из них является уравнением изоэнергетической поверхности $\varepsilon(p_x, p_y, p_z) = \text{const}$, а второе — уравнением плоскости, перпендикулярной магнитному полю, расстояние которой от начала координат равно фиксированному значению $p_{||}$. Совместное решение этих уравнений определяет кривую, по которой изоэнергетическая поверхность (3.17) пересекается плоскостью (3.18), перпендикулярной магнитному полю (рис. 125).

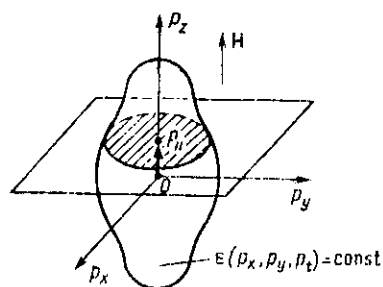


Рис. 125

В зависимости от топологии изоэнергетической поверхности и направления магнитного поля траектория электрона в фазовом пространстве может быть либо замкнутой (определяющей финитное движение), либо открытой, непрерывно проходящей через все p -пространство (и определяющей инфинитное движение).

Конкретный вид траектории электрона в p -пространстве зависит от формы изоэнергетической поверхности $\varepsilon(p) = \text{const}$, от ее ориентации по отношению к магнитному полю и от величины проекции импульса p на направление магнитного поля. Примеры различных траекторий электрона для энергетической поверхности, имеющей форму гантели, показаны на рис. 126.

Зависимость формы и размеров траектории электрона в p -пространстве от величины $p_{||}$ можно проиллюстрировать на при-

мере сферической изоэнергетической поверхности: $\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_0} =$

$= \varepsilon = \text{const}$. Пусть магнитное поле $H = H_z$ направлено по оси z . Тогда при $p_{||} = p_z = p_{z_0} = \text{const}$ электрон движется по траектории, уравнение которой $p_x^2 + p_y^2 = 2m_0\varepsilon - p_{z_0}^2$. Это не что иное, как уравнение окружности, расположенной в плоскости $p_z = p_{z_0}$. Радиус окружности $\sqrt{2m_0\varepsilon - p_{z_0}^2}$ уменьшается при увеличении p_{z_0} . При $p_{z_0} = \sqrt{2m_0\varepsilon}$ радиус окружности обращается в нуль, траектория электрона вырождается в точку $p_z = p_{z_0}$, $p_x = p_y = 0$.

Траектория электрона в импульсном пространстве определяет траекторию электрона в кристаллической решетке (в r -пространстве). Чтобы это показать, спроектируем уравнение (3.13)

*) Здесь и далее для простоты траекторий электрона в импульсном пространстве называется траектория, которую описывает при движении электрона конец его квазиимпульса, или траектория точки, изображающей электрон в импульсном пространстве.

на плоскость, перпендикулярную направлению магнитного поля:

$$\frac{d\mathbf{p}_\perp}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}_\perp \mathbf{H}] = \frac{e}{c} \left[\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dt} \mathbf{H} \right], \quad (3.19)$$

где $\mathbf{p}_\perp$, $\mathbf{v}_\perp$, $\mathbf{r}_\perp$ — компоненты импульса, скорости и радиус-вектора электрона в плоскости проекции. Векторы $\frac{d\mathbf{r}_\perp}{dt}$, $\mathbf{H}$ и $\frac{d\mathbf{p}_\perp}{dt}$ взаим-

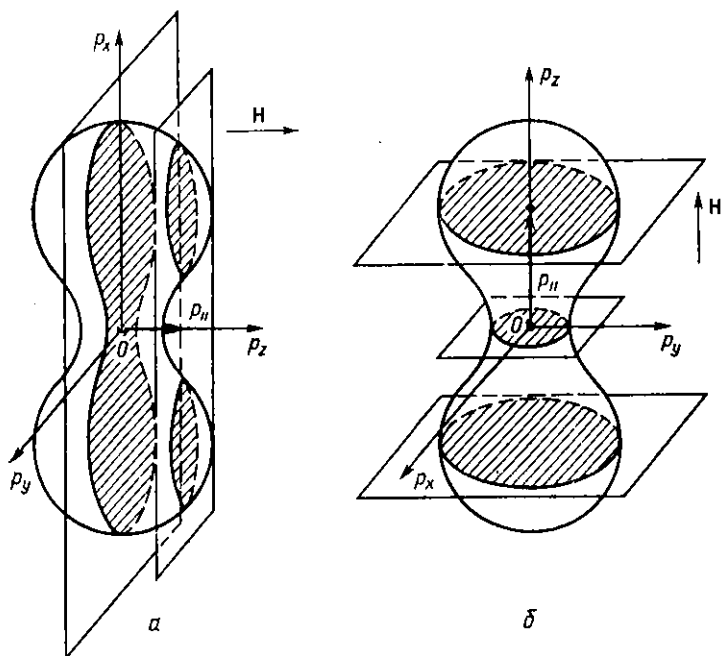


Рис. 126

но перпендикулярны. После интегрирования уравнения (3.19) для модулей $|\mathbf{p}_\perp|$ и $|\mathbf{r}_\perp|$ получим

$$|\mathbf{p}_\perp| = \frac{|e|H}{c} |\mathbf{r}_\perp|, \quad (3.20)$$

т. е. радиус-векторы $\mathbf{r}_\perp$ и $\mathbf{r}_\perp$, определяющие траекторию электрона в $\mathbf{p}$ -пространстве и проекцию траектории электрона в $\mathbf{r}$ -пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю, по абсолютной величине пропорциональны друг другу, и коэффициент пропорциональности $\frac{|e|H}{c}$ зависит только от величины магнитного поля. Следовательно, проекция траектории электрона в $\mathbf{r}$ -пространстве на плоскость, перпендикулярную $\mathbf{H}$, совпадает по форме с соответствующей траекторией электрона в $\mathbf{p}$ -про-

странстве, но отличается от нее по размерам в $\frac{c}{|e|H}$ раз. Кроме того, учтем, что скорость электрона $v_{\perp} = \frac{dr_{\perp}}{dt}$ в r -пространстве в каждой точке траектории перпендикулярна скорости $\frac{dr_{\perp}}{dt}$ в r -пространстве. Это означает, что каждый элемент проекции траектории в r -пространстве перпендикулярен соответствующему элементу траектории в r -пространстве, т. е. траектории повернуты относительно одна другой на угол 90° вокруг направления магнитного поля.

Таким образом, чтобы по известной траектории электрона в r -пространстве получить проекцию его траектории на плоскость, перпендикулярную полю $\mathbf{H}$, в r -пространстве (см. рис. 127), нуж-

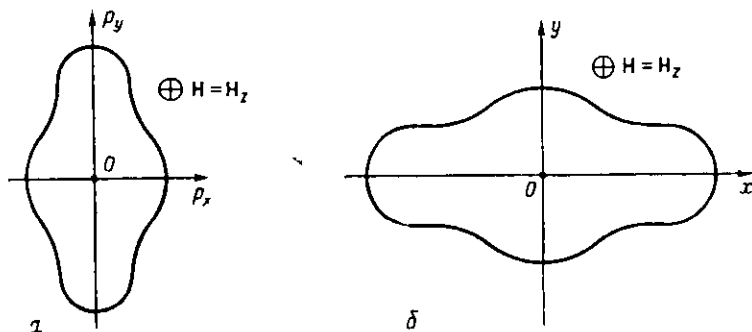


Рис. 127

но повернуть исходную траекторию на 90° по часовой стрелке (поворот по правилу буравчика, движение буравчика совпадает с направлением $\mathbf{H}$) вокруг направления магнитного поля и изменить ее масштаб в $\frac{c}{|e|H}$ раз. Направление движения электрона

по траектории при этом преобразовании, очевидно, сохраняется.

В частном случае при $p_{\parallel}=0$ замкнутой траектории в r -пространстве соответствует подобная ей и также замкнутая траектория в r -пространстве. Иными словами, при $p_{\parallel}=0$ траектория электрона в r -пространстве расположена целиком в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Компонента скорости $v_{\parallel}$ равна нулю не только для сечения изоэнергетической поверхности плоскостью, соответствующей $p_{\parallel}=0$, но также и для сечений, площадь S которых, как функция $p_{\parallel}$, достигает экстремального (максимального или минимального) значения, так как скорость электрона всегда направлена по нормали к изоэнергетической поверхности (см. рис. 126, б).

При $p_{\parallel} \neq 0$ замкнутая в r -пространстве траектория обычно соответствует в r -пространстве движению по винтовой линии: за

каждый оборот по траектории в p -пространстве в течение времени T_H электрон еще дополнительно смещается в r -пространстве вдоль магнитного поля, так как при $p_{||} \neq 0$ электрон, вообще говоря, имеет отличную от нуля компоненту скорости $v_{||}$. В случае, когда траектория в p -пространстве является открытой в некотором направлении p , траектория электрона в r -пространстве не ограничена в направлении, перпендикулярном p . Примером открытой траектории является движение электрона по поверхности гофрированного цилиндра (см. рис. 121) в магнитном поле, перпендикулярном оси цилиндра.

Характерный размер траектории фермиевского электрона в кристаллической решетке определяется размером $\frac{cp_{\perp}}{|e|H}$ его орбиты. Поэтому условие применимости квазиклассического описания для электрона в металле имеет вид

$$\lambda_B \ll \frac{cp_F}{|e|H}. \quad (3.21)$$

Для электрона на поверхности Ферми $p_F \sim \hbar/a$ и, следовательно, $\lambda_B \sim a$. Неравенство (3.21) при этом эквивалентно условию

$$H \ll H_a = \frac{c\hbar}{|e|a^2} \sim (10^8 \div 10^9) \text{ Э}. \quad (3.22)$$

Квазиклассическое описание движения электрона в металле, помещенном в магнитном поле, практически всегда оправдано, так как для реально достижимых в лабораторных условиях магнитных полей $H \sim 10^6$ Э неравенство (3.22) заведомо выполнено. Специальные случаи, в которых существен квантовый подход к движению электрона, будут рассмотрены особо.

Рассмотрим условия финитного движения электрона в магнитном поле. В отличие от финитного движения в электрическом поле, которое практически невозможно реализовать из-за громадных размеров траектории (см. § 1 гл. 3), циклическое движение электрона в магнитном поле представляет собой обычное явление.

Как было показано ранее, характерный размер орбиты электрона определяется размерами площади сечения поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю. Поэтому орбиты ограниченных размеров соответствуют либо замкнутым поверхностям Ферми, либо определенным ориентациям магнитного поля H по отношению к направлению открытости у открытых поверхностей. Например, для поверхности типа «гофрированный цилиндр» замкнутые орбиты соответствуют ориентации H под небольшим углом к оси цилиндра. Если этот угол увеличивать до 90° , орбита постепенно вытягивается и переходит в открытую траекторию.

Условием циклического движения в магнитном поле является выполнение неравенства

$$l > r_H \frac{cp_{\perp}}{|e| \cdot H}, \quad (3.23)$$

где l — длина свободного пробега электрона.

Смысл этого неравенства очевиден: на длине свободного пробега электрон должен завершить по крайней мере один (или несколько) циклов движения. Заменяем в неравенстве (3.23) на близкую по порядку величину $p_F \sim \hbar/a$ и перепишем его в виде

$$l > \frac{c\hbar}{|e| aH}.$$

Отсюда следует, что для осуществления циклического движения электронов в металле необходимо, чтобы величина магнитного поля удовлетворяла неравенству

$$H > \frac{a}{l} \frac{c\hbar}{|e| a^2} = \frac{a}{l} H_a \sim \frac{a}{l} (10^8 + 10^9) \text{ Э.} \quad (3.24)$$

При низких температурах в достаточно чистых и совершенных монокристаллических образцах металлов длина свободного пробега в десятки и сотни тысяч раз превосходит межатомные расстояния. Поэтому циклическое движение в магнитном поле в принципе может наблюдаться уже в полях порядка сотен эрстед.

Остановимся на характере движения в магнитном поле квазичастиц, расположенных на изоэнергетических поверхностях электронного и дырочного типов. Сила Лоренца $F_H = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{H}]$ создает центростремительное ускорение электрона. Векторы $\mathbf{v}$, $\mathbf{H}$ и $-\mathbf{F}_H$ (поскольку для электрона $e < 0$) образуют правовинтовую тройку. Следовательно, в магнитном поле, направленном от наблюдателя, свободный электрон

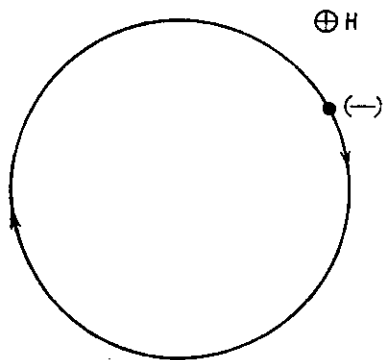


Рис. 128

вращается по часовой стрелке (рис. 128). В таком же направлении движется в магнитном поле изображающая его точка на сфере Харрисона.

Рассмотрим трехвалентный «металл» с плоской квадратной решеткой. Изоэнергетические кривые в первой и второй зонах для такого металла были построены в § 6 гл. 2 (см. рис. 94, 95).

В магнитном поле, перпендикулярном плоскости решетки и направленном от наблюдателя, прецессия электронов по окружности Харрисона (см. рис. 92) происходит по часовой стрелке. Включение конечного эффективного потенциала $|V_{\text{эф}}|$ приводит

к тому, что окружность Харрисона разрывается на отдельные куски (см. рис. 93). Однако направление движения электрона по каждому куску измениться не может (рис. 129, 130). С появлением границ зоны Бриллюэна значения импульса в точках A и A' , B и B' , C и C' , D и D' становятся эквивалентными, так как они различаются на векторы основных трансляций в p -пространстве, равные по модулю $2\pi\hbar/a$. Поэтому, когда электрон, двигаясь по кривой 1 (см. рис. 129), попадает в точку A на границе зоны Бриллюэна, составляющая его импульса по оси p_x скачком изменяется на величину $2\pi\hbar/a$. В результате электрон отражается границей и затем переходит в эквивалентную точку A' . Далее движение по кривой 2 происходит непрерывно до следующей расположенной на границе зоны Бриллюэна точки B' , из которой электрон переходит в эквивалентную точку B . Аналогичное движение происходит по кривым 3 и 4.

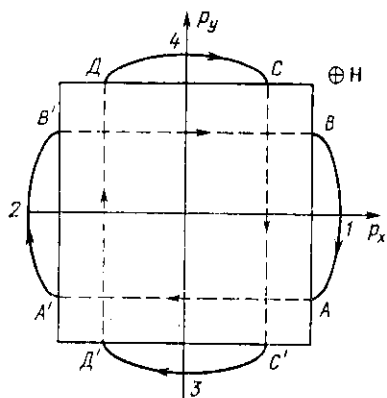


Рис. 129

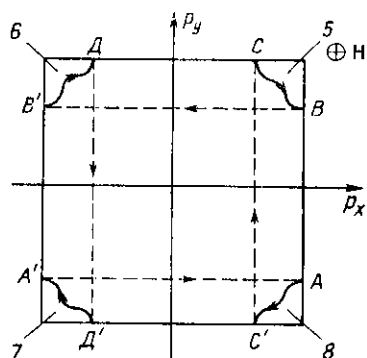


Рис. 130

Заметим, что электроны, расположенные на кусках 1 и 2, остаются на них все время (если не происходит рассеяния, при котором квазиимпульс электрона изменяется произвольно) и не переходят на кривые 3 и 4. То же самое справедливо и для электронов на кривых 3 и 4.

Картина, иллюстрирующая зеркальное отражение электрона от границ зоны Бриллюэна, становится более наглядной, если предварительно транслировать кривые 1 и 2 в первую зону Бриллюэна. При этом рис. 129 переходит в рис. 131, на котором кривые 1 и 2 заменены эквивалентными кривыми 1' и 2' в первой зоне. Теперь видно, что в точке B' нормальная к границе зоны составляющая импульса изменяет знак и электрон перебрасывается в точку B . Повторное отражение от границы зоны в точке A перебрасывает электрон в точку A' .

Поскольку реальное движение электрона в g -пространстве непрерывно, целесообразно сделать это движение непрерывным и в

p -пространстве, соединив куски 1 и 2 или 3 и 4 в непрерывные кривые (т. е. совместив друг с другом эквивалентные точки A и A' , B и B' и т. д.) (рис. 132). В этом и заключается физический смысл трансляции кусков окружности Харрисона на период $2\pi\hbar/a$ по осям p_x и p_y , проведенной в § 6 гл. 2. Рассмотренное нами движение по кривым электронного типа во второй зоне осуществляется по часовой стрелке, т. е. в том же направлении, что и движение свободного электрона.

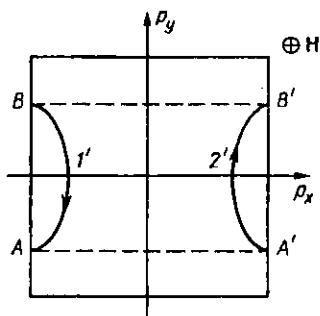


Рис. 131

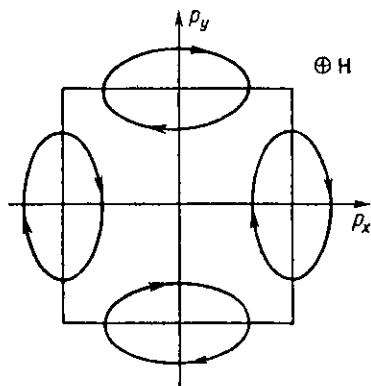


Рис. 132

Рассмотрим движение электрона по кривым 5—8 (см. рис. 130). По каждой из этих кривых электрон движется по отношению к центру первой зоны Бриллюэна в направлении по часовой стрелке. Пусть электрон находится, например, на кривой 5.

В точке B происходит отражение от границы, и электрон перебрасывается в эквивалентную точку B' на кривой 6. Аналогично из точки D электрон перебрасывается в точку D' , из точки A' — в A и из C' — в точку C . Весь цикл движения в p -пространстве до возвращения вновь на кривую 5 (полный оборот в магнитном поле) показан на рис. 130 стрелками.

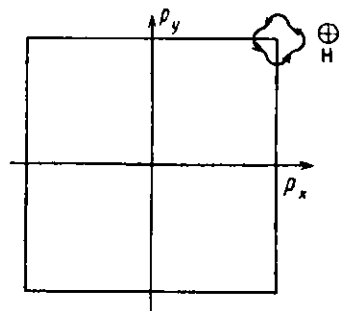


Рис. 133

Трансляция кривых 5—8 на периоды $2\pi\hbar/a$ по осям p_x и p_y приводит к построению замкнутой изоэнергетической кривой, имеющей форму «розетки» в одном из углов первой зоны Бриллюэна (рис. 133). Ориентация, форма и размеры «розетки» поз-

воляют определить проекцию орбиты реального движения электрона в g -пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Прецессия по «розетке» происходит против часовой

стрелки, т. е. в противоположном направлении по отношению к прецессии свободного электрона. Такое направление прецессии имеет положительно заряженная частица с положительной эффективной массой ($m^* > 0$) либо отрицательно заряженная частица с отрицательной эффективной массой ($m^* < 0$). Двойственность представления квазичастицы, расположенной на дырочной изоэнергетической поверхности, связана с тем, что характер движения заряженной частицы в электрических и магнитных полях определяется не знаками ее заряда e или массы m^* в отдельности, а знаком отношения e/m^* , который не меняется при переходе от представления $e < 0, m^* < 0$ к представлению $e > 0, m^* > 0$.

Для описания поведения электрона во внешних полях оба этих представления являются совершенно эквивалентными.

Отметим, что квазичастицы, расположенные на электронных и дырочных изоэнергетических поверхностях, реально отличаются по своим физическим свойствам и в электрическом и в магнитном полях ведут себя по-разному.

Движение в магнитном поле квазичастиц, расположенных на открытых изоэнергетических поверхностях, имеет некоторые специфические черты, которые необходимо рассмотреть отдельно.

Как уже указывалось в § 6 гл. 2, при изложении правил классификации изоэнергетических поверхностей, открытые поверхности, как правило, не могут быть отнесены к электронному или дырочному типу. В зависимости от ориентации магнитного поля и положения плоскости $p_{\parallel} = \text{const}$ квазичастицы на открытых изоэнергетических поверхностях могут двигаться по замкнутым орбитам как электронного, так и дырочного типа. При этом направление их движения соответствует или движению электрона, или движению дырки. Рассмотрим в качестве примера поверхность Ферми у металлов первой группы Cu, Ag и Au в схеме повторяющихся зон. Она состоит из сфер, соединенных между собой «шейками» в направлении пространственных диагоналей (см. рис. 90). Если бы «шейки» отсутствовали, то такая поверхность Ферми была бы замкнутой и относилась бы, несомненно, к электронному типу. Однако при наличии «шеек» ситуация усложняется.

Действительно, при ориентации магнитного поля вдоль направлений, эквивалентных $[100]$ или близких к ним, наблюдаются электронные орбиты, соответствующие, например, экстремальным сечениям «пуза» поверхности Ферми в каждой ячейке p -пространства. Но при ориентации поля вдоль оси $[110]$, кроме той же электронной орбиты вокруг «пуза» и малой электронной орбиты вокруг «шейки», появляется дырочная орбита типа «собачья кость». Она ограничивает пустое пространство между четырьмя сферами и соответствует экстремальному дырочному сечению. Орбита типа «собачья кость» хорошо видна на рис. 90. На рис. 91 она выделена пунктиром. Если наряду с экстремальными рассмотреть неэкстремальные сечения поверхности Ферми у Cu, Ag, Au, то дырочные орбиты можно обнаружить практиче-

ски при всех ориентациях $\mathbf{H}$. Они имеют тот же характер, что и орбита типа «собачья кость»: каждая из них ограничивает пустое пространство между четырьмя сферами.

Электронные и дырочные орбиты наблюдаются у всех поверхностей Ферми типа «монстр». Электроны, движущиеся в магнитном поле по различным орбитам, дают различные вклады в те или иные физические эффекты. В одних эффектах сильнее проявляется электронный характер движения, в других — дырочный. Вследствие этого такую поверхность Ферми, как «монстр», невозможно отнести к определенному типу, о чем уже говорилось выше.

В качестве исключения из правила можно указать на открытую поверхность Ферми типа «гофрированный цилиндр» (см. рис. 121). В этом случае для магнитного поля, направленного под углом θ к оси цилиндра, во всех сечениях наблюдаются электронные орбиты. Они удлиняются по мере того, как угол θ приближается к 90° . Однако ни при какой ориентации магнитного поля не существует дырочных орбит. Таким образом, поверхность типа «гофрированный цилиндр» может быть отнесена к электронным поверхностям.

§ 3. ЭФФЕКТИВНАЯ ЦИКЛОТРОННАЯ МАССА КВАЗИЧАСТИЦЫ

В § 1 настоящей главы для описания движения электрона в кристалле под действием внешних сил было введено понятие тензора $\dot{m}_{ij}$ эффективных масс, связывающего ускорение электрона с вектором внешней силы. Как и всякий тензор 2-го ранга, тензор $\dot{m}_{ij}$ преобразует один вектор в другой, в данном случае — вектор ускорения $d\mathbf{v}/dt$ в вектор внешней силы $\mathbf{F}_{\text{внеш}}$. Поэтому формально компоненты тензора эффективных масс могут принимать любые положительные и отрицательные значения. Отрицательные значения компонент тензора $\dot{m}_{ij}$, приведенного к главным осям, означают, что под действием внешней силы определенного направления частица ускоряется в противоположном направлении. Если же компоненты тензора $\dot{m}_{ij}$ обращаются в бесконечность, то это значит, что внешняя сила не вызывает ускорения и не меняет скорости электрона. В § 1 гл. 3 было показано, что экзотические значения, которые могут принимать компоненты тензора эффективных масс, связаны с наличием сил реакции кристаллической решетки и что тензор эффективной массы, таким образом, описывает движение электрона одновременно в поле известных внешних и неизвестных внутрикристаллических сил.

Чтобы еще раз подчеркнуть естественность отрицательного значения эффективной массы, рассмотрим следующий пример. Под действием силы тяжести в вакууме движется шар. Его движение является ускоренным и направлено к притягивающему

центру. Движение шара описывается уравнением $M \frac{dv}{dt} = F$, где M — истинная масса шара, а F — действующая на него внешняя сила. Поместим теперь шар в сосуд с жидкостью, удельный вес $d_{\text{ж}}$ которой превышает удельный вес $d_{\text{ш}}$ шара. Мы увидим, что под действием той же притягивающей силы F шар движется в противоположную сторону, т. е. ведет себя как тело с отрицательной массой (величина которой к тому же не равна $-M$, а составляет, как нетрудно заметить, $-\frac{M}{(d_{\text{ж}}/d_{\text{ш}} - 1)}$). В действительности это означает, что сила, действующая на шар со стороны жидкости, превышает силу F .

Таким образом, общая идея введения понятия «эффективной» массы заключается в следующем: сравниваются движения частицы в среде (в кристалле) и свободной частицы под действием одной и той же внешней силы. Точнее, сравниваются или уравнения движения, или какие-либо параметры движения, в которые входит масса частицы. Выражение, эквивалентное массе свободной частицы, называют «эффективной» массой, определяющей описываемый вид движения (для различных видов движения «эффективная» масса имеет разные выражения).

Однако, так как все виды движения частицы определяются ее законом дисперсии, эффективные массы, введенные различными способами, связаны между собой и могут быть выражены через параметры закона дисперсии.

Определим эффективную массу, описывающую движение электрона в кристалле в магнитном поле H , которая получила название эффективной циклотронной массы. Для этой цели сравним выражение для периода прецессии в магнитном поле свободного электрона и электрона, движущегося по замкнутым орбитам в кристалле. Сделать это можно двумя способами. Первый способ наиболее нагляден и основан на приближении почти свободных электронов в модели Харрисона. Второй, более общий способ, не связанный ни с какими модельными представлениями, позволяет определить эффективную циклотронную массу через закон дисперсии.

Рассмотрим сначала первый способ.

При $|V_{\text{эф}}| = 0$ электрон движется в магнитном поле как свободная частица по окружностям (являющимся сечениями сферы Харрисона плоскостями, перпендикулярными H) с одним и тем же периодом

$$T_0 = \frac{2\pi m_0}{|e| H}.$$

При отличном от нуля (по малом) эффективном потенциале $V_{\text{эф}}$ траектория электрона в результате брэгговских отражений разбивается на несколько траекторий, соответствующих различным изоэнергетическим поверхностям в зонах (см. рис. 131 и 132, а также рис. 130 и 133). Период T_H движения электрона по этим

траекториям легко определить: он равен, очевидно, T_0 , умноженному на отношение суммарного угла, описываемого импульсом электрона между плоскостями разрыва энергии, к полному углу 2π (угол 2π описывает за период импульс свободного электрона). При этом, естественно, предполагается, что эффективный потенциал мал и движение электрона по отдельному куску сферы Харрисона, разделенной границами зон Бриллюэна, практически не отличается от движения свободного электрона по этому же куску сферы при $|V_{эф}|=0$.

Поясним сказанное на рассмотренном выше примере трехвалентного «металла» с плоской квадратной решеткой, помещенного в магнитное поле H , перпендикулярное плоскости решетки. Для этого вновь вернемся к рис. 129 и 130.

Траектория электрона в рассматриваемом металле состоит из четырех кусков 1—4 окружности Харрисона (см. рис. 129), отличных от четырех кусков 5—8, составляющих дырочную траекторию (см. рис. 130). За периоды движения импульсы электрона и дырки описывают углы, соответственно равные $2\Delta\varphi_{эл}$ и $4\Delta\varphi_{дыр}$ (рис. 134). Поэтому циклотронные массы электрона и дырки выражаются формулами

$$m_{эл}^* = \frac{2\Delta\varphi_{эл}}{2\pi} m_0, \quad |m_{дыр}^*| = \frac{4\Delta\varphi_{дыр}}{2\pi} m_0. \quad (3.25)$$

Если орбиты малы, то соответствующие им циклотронные массы могут быть много меньше массы свободного электрона m_0 .

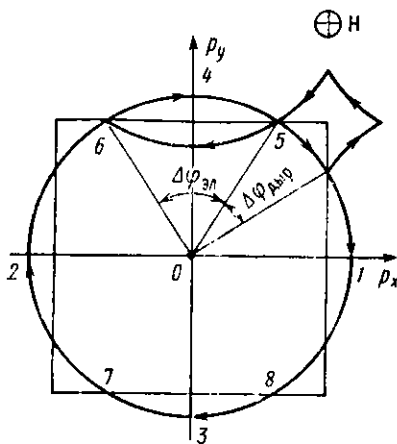


Рис. 134

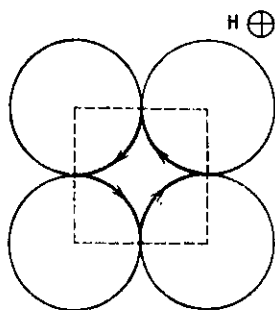


Рис. 135

В трехмерном случае для определения циклотронной массы строится сфера Харрисона и находятся все ее пересечения с плоскостями разрыва энергии, как это было проделано при построении поверхности Ферми. Затем находится проекция этих линий

на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Проекция импульса электрона на эту плоскость движется по кругу и испытывает скачки в точках пересечения траектории с брэгговскими плоскостями. Циклотронная масса, соответствующая какой-либо орбите, получается, если сложить все углы между брэгговскими отражениями и умножить эту сумму на величину $m_0/2\pi$.

На рис. 135 показана дырочная орбита, состоящая из дуг четырех касающихся друг друга окружностей, соответствующих сечению четырех сфер Харрисона некоторой плоскостью, перпендикулярной $\mathbf{H}$. При движении по этой орбите квазиимпульс дырки описывает угол, равный 2π , и, следовательно, относящаяся к ней циклотронная дырочная масса составляет m_0 .

Для отдельных орбит циклотронные массы могут превосходить значение m_0 . Это связано с тем, что период прецессии электронов на сфере Харрисона не зависит от положения плоскости $p_{\parallel} = \text{const}$, в которой расположена орбита электрона, т. е. период прецессии по малой окружности, соответствующей нецентральному сечению сферы Харрисона, совпадает с периодом прецессии по окружности центрального сечения. При этом полный угол, который описывает проекция квазиимпульса электрона на соответствующую плоскость сечения, перпендикулярную магнитному полю $\mathbf{H}$, может превосходить 2π . Таким способом могут быть определены все массы на поверхности Ферми. При этом можно вычислить количество электронов dN на поверхности Ферми, циклотронные массы которых лежат в интервале от m^* до $m^* + dm^*$, и найти функцию распределения циклотронных масс $dN/dm^* = f(m^*)$ при данной ориентации поля $\mathbf{H}$.

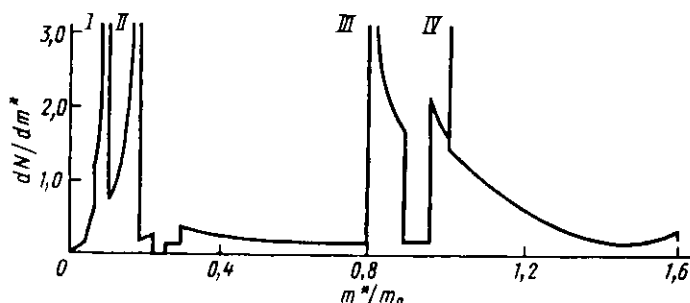


Рис. 136

На рис. 136, заимствованном из книги У. Харрисона «Псевдопотенциалы в теории металлов» (М.: «Мир», 1968), приведен результат вычисления dN/dm^* для алюминия при направлении магнитного поля вдоль кристаллографической оси $[110]$. Полученные значения m^* заполняют почти весь интервал от 0 до $1,6m_0$.

Спектр значения эффективной массы m^* однозначно определяется зонной структурой металла. Поэтому эффективная цикло-

тронная масса, рассчитанная на основе зонной структуры, получила название зонной массы. Зонная масса в литературе обычно обозначается индексом bs (band structure): m_{bs}^* .

Кривая $\frac{dN}{dm^*} = f(m^*)$ на рис. 136 нормирована так, чтобы $\int_0^{m_{\max}^*} f(m^*) dm^*/m_0$ равнялся единице. Сингулярные точки на кривой относятся к экстремальным массам, которые соответствуют траекториям квазичастиц на дырочной поверхности во второй зоне (пик III при $m^*/m_0=0,8$) и на электронных поверхностях в третьей зоне (пики I, II, IV при значениях $m^*/m_0=0,1$; 0,17 и 1,0 соответственно). Для экстремальных масс

$$\frac{dm_{bs}^*}{dp_{\parallel}} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{dN}{dp_{\parallel}} \left(\frac{dm_{bs}^*}{dp_{\parallel}} \right)^{-1} = \infty.$$

Второй способ введения эффективной циклотронной массы был предложен И. М. Лифшицем. Он основан на сравнении периода прецессии свободного электрона $T_0 = \frac{2\pi cm_0}{|e|H}$ с периодом T_H движения электрона по произвольной замкнутой траектории в $\mathbf{p}$ -пространстве для заданной поверхности Ферми при произвольном законе дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$. Период T_H , очевидно, совпадает со временем, в течение которого электрон проходит один виток спирали в $\mathbf{r}$ -пространстве.

Рассмотрим произвольную замкнутую изоэнергетическую поверхность $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$. Зададим направление магнитного поля $\mathbf{H}$ и величину $p_{\parallel}$, определяющую положение плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$, пересечение которой с поверхностью $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ определяет траекторию электрона в $\mathbf{p}$ -пространстве. Разложим квазимпульс электрона и его скорость на составляющие, параллельные и перпендикулярные магнитному полю: $p_{\parallel}$, $v_{\parallel}$, $p_{\perp}$, $v_{\perp}$ (рис. 137).

Проекцию уравнения движения электрона (3.13) на плоскость сечения для абсолютных значений $v_{\perp}$ и $\mathbf{H}$ можно записать следующим образом:

$$\frac{dl_{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{|e|}{c} v_{\perp} H, \quad (3.26)$$

где dl — элемент дуги траектории в $\mathbf{p}$ -пространстве. Интегрируя уравнение (3.26), получаем выражение для периода обращения электрона по орбите:

$$T_H = \frac{c}{|e|H} \oint_{\mathcal{L}} \frac{dl_{\mathbf{p}}}{v_{\perp}}. \quad (3.27)$$

Интеграл берется по замкнутому контуру $\mathcal{L}$ траектории в плоскости сечения. Обозначим через $\mathbf{n}$ единичный вектор нормали к траектории в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$. Вектор скорости $\mathbf{v}_\perp$ параллелен $\mathbf{n}$ и равен

$$v_\perp = \frac{\partial \varepsilon}{\partial p_\perp}.$$

Это означает, что при увеличении энергии на $\delta \varepsilon$ каждый элемент траектории dl_p сместится по нормали $\mathbf{n}$ на расстояние $\delta p_\perp =$

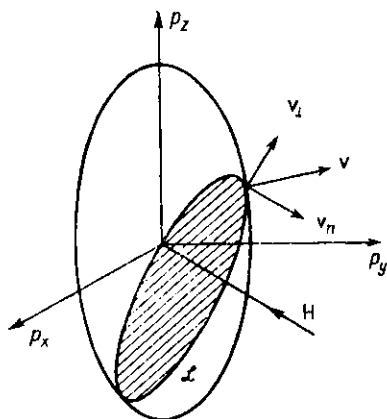


Рис. 137

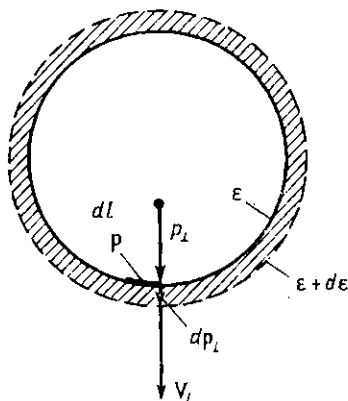


Рис. 138

$= \delta \varepsilon / v_\perp$. Приращение площади сечения δS при этом (заштрихованная часть на рис. 138) будет равно

$$\delta S = \oint_{\mathcal{L}} dl_p \delta p_\perp = \oint_{\mathcal{L}} \frac{dl_p}{v_\perp} \delta \varepsilon.$$

Но приращение $\delta \varepsilon$ не зависит от точки на траектории и может быть вынесено за знак интеграла. Следовательно, частная производная $\frac{\partial S}{\partial \varepsilon}$ равна $\oint_{\mathcal{L}} \frac{dl_p}{v_\perp}$. Отсюда для периода T_H получим

$$T_H = \frac{c}{|e| H} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} = \frac{2\pi c \left(\frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \right)}{|e| H}. \quad (3.28)$$

Из сравнения (3.28) с выражением для периода обращения T_0 свободного электрона можно заключить, что при циклическом движении электрона с произвольным законом дисперсии величина

на $\frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\partial S}{\partial \epsilon}$ является эффективной циклотронной массой электрона:

$$m_c^* = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\partial S}{\partial \epsilon}. \quad (3.29)$$

Так как объемы p -пространства, заключенные внутри электронных изоэнергетических поверхностей, увеличиваются с ростом энергии, а у дырочных, напротив, уменьшаются, то для поверхностей электронного типа $\partial S/\partial \epsilon > 0$ и эффективная циклотронная масса m_c^* положительна, а для поверхностей дырочного типа $\partial S/\partial \epsilon < 0$ и m_c^* отрицательна. Различные знаки циклотронных масс означают, что прецессия квазичастиц в магнитном поле на электронных и дырочных поверхностях происходит в противоположных направлениях.

Изложенный метод введения циклотронной массы показывает, что она является величиной, усредненной по периоду лармовской прецессии электрона или по траектории прецессии за один цикл. Из выражения (3.29) следует, что m_c^* определяется законом дисперсии и, вообще говоря, различна при различных ориентациях магнитного поля $\mathbf{H}$. Если закон дисперсии известен, то можно установить связь между циклотронной массой и параметрами закона дисперсии. В частном случае, когда закон дисперсии выражается через компоненты тензора эффективных масс m_{ij} , эффективную циклотронную массу m_c^* можно также выразить через эти параметры.

Наиболее простым является случай квадратичного изотропного закона дисперсии $\epsilon = p^2/2m$. Соответствующий тензор эффективной массы $m_{ij} = \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_i \partial p_j} \right)^{-1}$ может быть записан в виде $m_{ij} = m \cdot \delta_{ij}$, где δ — символы Кронекера:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Направим магнитное поле по оси z ($H = H_z$). Уравнения, определяющие траекторию электрона в p -пространстве, имеют вид

$$\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} = \epsilon - \frac{p_{z_0}^2}{2m}; \quad p_{\parallel} = p_{z_0} = \text{const}. \quad (3.30)$$

Площадь $S(\epsilon, p_{z_0})$ соответствующего сечения изоэнергетической поверхности плоскостью, перпендикулярной $\mathbf{H}$, равна

$$S(\epsilon, p_{z_0}) = \pi (p_x^2 + p_y^2) = \pi \left[2m \left(\epsilon - \frac{p_{z_0}^2}{2m} \right) \right]. \quad (3.31)$$

Дифференцируя это выражение по энергии, находим, что циклотронная масса m_c^* электронов (3.29) совпадает с m и не зависит

от положения секущей плоскости, которая определяется величиной импульса p_{z_0} .

Вследствие сферической симметрии поверхности Ферми циклотронная масса m_c^* , естественно, не зависит и от направления $\mathbf{H}$. Таким образом, все электроны, расположенные на сферической изоэнергетической поверхности, имеют один и тот же циклотронный период. Как указывалось выше, площадь орбиты в $\mathbf{p}$ -пространстве уменьшается с ростом $p_{\parallel} = p_{z_0}$ и вырождается в точку при $p_{z_0} = \sqrt{2m\epsilon}$. Следовательно, скорость движения электронов по орбите уменьшается при уменьшении ее радиуса. Соответственно в $\mathbf{r}$ -пространстве движение по спирали вокруг магнитной силовой линии происходит тем медленнее, чем меньше радиус спирали.

Вблизи опорных точек (точек касания поверхности Ферми с плоскостями, перпендикулярными $\mathbf{H}$) $p_x = p_y = 0$, $p_z = \pm p_{z_0} = \pm \sqrt{2m\epsilon}$ электроны описывают бесконечно малую орбиту с той же частотой, что и электроны, расположенные в плоскости экстремального сечения $p_{z_0} = 0$. Первые из них движутся в $\mathbf{r}$ -пространстве практически с фермиевской скоростью в направлении магнитного поля, в то время как вторые описывают замкнутые окружности в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

В качестве второго примера рассмотрим квадратичный анизотропный закон дисперсии:

$$\epsilon = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y} + \frac{p_z^2}{2m_z}. \quad (3.32)$$

Соответствующая изоэнергетическая поверхность описывается уравнением (3.10) и представляет собой трехосный эллипсоид с полуосями $\sqrt{2m_x\epsilon}$, $\sqrt{2m_y\epsilon}$, $\sqrt{2m_z\epsilon}$. Матрица тензора эффективной массы $m_{ij}^* = \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_i \partial p_j} \right)^{-1}$ в главных осях эллипсоида имеет следующий вид:

$$\{m_{ij}^*\} = \begin{pmatrix} m_x & 0 & 0 \\ 0 & m_y & 0 \\ 0 & 0 & m_z \end{pmatrix}.$$

Направим по-прежнему магнитное поле вдоль оси z . Орбиты электронов определяются сечениями $p_{\parallel} = p_{z_0} = \text{const.}$ Известно, что любое сечение эллипсоида плоскостью является эллипсом. Найдем площадь $S(\epsilon, p_{z_0})$ сечения, соответствующего плоскости $p_z = p_{z_0}$.

Уравнение эллипса в плоскости сечения имеет вид

$$\frac{p_x^2}{2m_x \left(\epsilon - \frac{p_{z_0}^2}{2m_z} \right)} + \frac{p_y^2}{2m_y \left(\epsilon - \frac{p_{z_0}^2}{2m_z} \right)} = 1. \quad (3.33)$$

Площадь сечения $S(\epsilon, p_{z_0})$ при $p_z = p_{z_0}$ равна

$$S(\epsilon, p_{z_0}) = 2\pi \sqrt{m_x m_y} \left(\epsilon - \frac{p_{z_0}}{2m_z} \right). \quad (3.34)$$

Отсюда, согласно (3.29), циклотронная масса $(m_c^*)_z$, соответствующая любому сечению, при $\mathbf{H}$, параллельном p_z , выражается только через компоненты тензора эффективных масс m_x и m_y :

$$(m_c^*)_z = \sqrt{m_x \cdot m_y}. \quad (3.35)$$

Направляя магнитное поле вдоль осей x и y , можно найти аналогичным образом циклотронные массы $(m_c^*)_x$ и $(m_c^*)_y$, относящиеся к любым сечениям $p_x = \text{const}$ и $p_y = \text{const}$ соответственно:

$$(m_c^*)_x = \sqrt{m_y \cdot m_z}; \quad (m_c^*)_y = \sqrt{m_x \cdot m_z}. \quad (3.36)$$

Можно показать, наконец, что для произвольного направления магнитного поля по отношению к главным осям эллипсоида циклотронная масса $(m_c^*)_n$ выражается через три главные компоненты тензора m_{ii} и направляющие косинусы вектора $\mathbf{n}$:

$$(m_c^*)_n = \sqrt{\frac{m_x \cdot m_y \cdot m_z}{m_x \cos^2 \alpha + m_y \cos^2 \beta + m_z \cos^2 \gamma}}, \quad (3.37)$$

где α , β и γ — углы между $\mathbf{n}$ и осями p_x , p_y и p_z . Таким образом, для квадратичного закона дисперсии, при котором изоэнергетическая поверхность является всегда эллипсоидом или сферой, циклотронная масса m_c^* не зависит от величины $p_{||}$ и в случае эллипсоида определяется только ориентацией магнитного поля по отношению к главным осям поверхности. Иными словами, в магнитном поле данного направления все электроны на поверхности эллипсоида или сферы в $\mathbf{p}$ -пространстве движутся с одной и той же частотой независимо от положения секущей плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$.

На эллипсоиде, как и на сфере, для любого направления поля существуют две опорные точки (точки A и A') касания поверхности с плоскостями, перпендикулярными магнитному полю $\mathbf{H}$ (рис. 139), вблизи которых электроны описывают бесконечно малые орбиты. Частота обращения по этим орбитам, однако, совпадает с циклотронной частотой для всех остальных орбит, расположенных в любом сечении изоэнергетической поверхности.

В случае произвольного закона дисперсии циклотронная масса m_c^* зависит от $p_{||}$. Поэтому частота ω_c прецессии электронов для различных сечений поверхности Ферми, вообще говоря, различна. Иными словами, в общем случае электронный газ на поверхности Ферми не представляет собой ансамбль квазичастиц, которые прецессируют в магнитном поле с одной и той же частотой. Однако при любом законе дисперсии существуют отдельные группы электронов, которые имеют близкие циклотронные

частоты. Такие группы расположены вблизи сечений изоэнергетической поверхности, на которых зависимость циклотронной массы от $p_{\parallel}$ имеет локальный максимум или минимум и $\partial m_c^*/\partial p_{\parallel}$ обращается в нуль. Указанные сечения для данного направления магнитного поля обычно экстремальны (минимальны или максимальны). Примерами таких сечений являются большое сечение плоскостью $p_z=0$ (центральное сечение) гантелеобразной изоэнергетической поверхности на рис. 126, а и три сечения этой же поверхности плоскостями, перпендикулярными p_z (рис. 126, б).

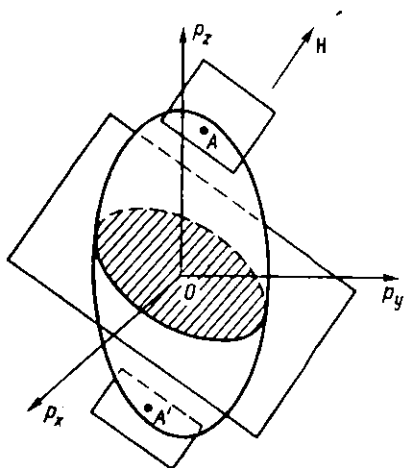


Рис. 139

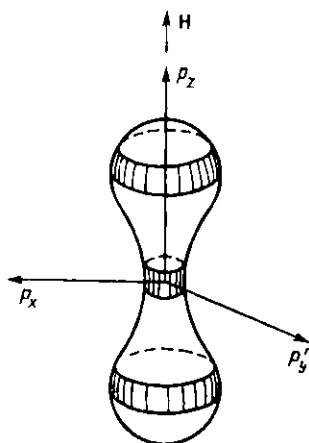


Рис. 140

Вблизи сечения, соответствующего $p_{\parallel} = p_{\parallel}^0$, при котором $\partial m_c^*/\partial p_{\parallel} = 0$ в разложении циклотронного периода $T_H = \frac{2\pi c}{|e|H} m_c^*$ по степеням разности $p_{\parallel} - p_{\parallel}^0$, отсутствуют члены первого порядка. Благодаря этому существует некоторая окрестность точки $p_{\parallel} = p_{\parallel}^0$ шириной $\Delta p_{\parallel}$, в которой зависимость периода от $p_{\parallel}$ можно пренебречь.

Электроны, расположенные в «пояске» шириной $\Delta p_{\parallel}$ вблизи $p_{\parallel}^0$, образуют группу квазичастиц, движущихся в магнитном поле практически с одной и той же частотой (рис. 140). Такие группы электронов дают резонансный вклад в различные эффекты. Вклад электронов вне «пояска» создает лишь монотонный (нерезонансный) фон.

В заключение заметим, что для открытых траекторий понятие эффективной циклотронной массы, связанное с периодом обращения по орбите, ввести нельзя. При переходе к открытой траектории период обращается в бесконечность. Значительно раньше, при достаточном удлинении траектории, циклический характер

движения электронов нарушается из-за процессов рассеяния. При каждом акте рассеяния электрон случайным образом переходит с одного сечения поверхности Ферми на другое.

Глава 4

РАССЕЯНИЕ В ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ

§ 1. ОБЩЕЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ О РАССЕЯНИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Как было показано в § 6 гл. 1, квазиимпульс электрона (а следовательно, и его энергия) не изменяется при движении в поле идеальной периодической решетки. Изменение квазиимпульса может иметь место только под влиянием неперiodической части потенциального поля. Это означает, что рассеяние электронов происходит на любых нарушениях идеальной структуры решетки. Такими нарушениями являются тепловые колебания (газ фононов), дефекты решетки (дислокации, вакансии, примесные атомы), отклонение от периодичности самосогласованного потенциала электронов V_{ee} , связанное с взаимодействием электронов друг с другом (рассеяние электрона на электронах).

Взаимодействия, при которых изменяются энергия и абсолютная величина импульса электрона, носят название неупругих. Взаимодействия, при которых импульс меняется по направлению и практически не меняется по величине, носят название упругих. В этом случае импульс электрона при взаимодействии передается всей решетке как целому. Если скорость электрона до упругого взаимодействия была v_e , то скорость центра масс решетки v_c после взаимодействия равна $v_c = \frac{m_e}{M} v_e$, где m_e и M — массы электрона и всего кристалла. Очевидно, что величиной v_c можно пренебречь и считать, что при упругом рассеянии электрона кристалл остается неподвижным.

Каждый механизм рассеяния характеризуется частотой ν и временем релаксации $\tau = 1/\nu$, а также длиной свободного пробега электрона $l = v_F \tau$.

Следует различать времена релаксации по импульсу τ_p и по энергии τ_e , которые характеризуют скорость изменения импульса или энергии в результате рассеяния. Параметры τ_p и τ_e определяют соответствующие длины свободного пробега $l_p = v_F \tau_p$ и $l_e = v_F \tau_e$. Для упругого рассеяния, при котором энергия электронов практически не изменяется, величины τ_p и τ_e сильно отличаются друг от друга, причем $\tau_e \gg \tau_p$. При неупругом рассеянии происходит релаксация как импульса, так и энергии. В этом случае τ_e и τ_p могут быть близки по порядку величины; однако, как правило, $\tau_e > \tau_p$, поскольку релаксация импульса происходит как за счет

изменения его абсолютной величины, так и за счет изменения направления.

В различных физических явлениях времена τ_p и τ_e могут иметь разные значения в зависимости от того, какой смысл вкладывается в понятие рассеяния электронов. Дело заключается в том, что единичный акт взаимодействия в большинстве случаев не эквивалентен акту рассеяния электрона. Например, при рассмотрении электропроводности под рассеянием электрона понимается такой процесс релаксации его импульса, при котором начальный импульс изменяется на величину порядка самого импульса. Такой процесс релаксации импульса в результате рассеяния на фононах при низких температурах может быть следствием большого числа последовательных элементарных актов взаимодействия электрона с фононами, каждый из которых приводит к весьма малому относительно изменению импульса. Таким образом, для характеристики элементарного акта взаимодействия необходимо ввести такое понятие, как его эффективность для рассматриваемого процесса рассеяния.

Приведем еще один пример релаксации энергии и импульса носителей заряда в металлах, относящийся к рассеянию электронов на неоднородностях и дефектах кристаллической решетки. Физической причиной такого рассеяния является возникновение в области дефекта локального электростатического потенциала, с которым электрон взаимодействует как отрицательно заряженная частица. Характер рассеяния на таком потенциале зависит от вероятности рождения фонона в результате взаимодействия. Если такая вероятность мала, то рассеяние на дефекте является в основном упругим. В любом случае вероятность упругих столкновений электронов с дефектами увеличивается при понижении температуры в результате уменьшения вероятности рождения фононов и увеличения вероятности передачи импульса всей кристаллической решетке в целом (как в эффекте Мессбауэра).

При абсолютном нуле температуры, когда фононы отсутствуют, электроны рассеиваются только на нарушениях кристаллической решетки, на атомах данного вещества, отличающихся по массе (изотопах), и на атомах примеси. Несмотря на то что такое рассеяние может быть достаточно интенсивным, энергия от электронной системы не передается решетке: электроны в основном состоянии не могут изменить свою энергию. Поэтому рассеяние электронов при $T=0$ К является абсолютно упругим.

При $T \neq 0$ К кроме рассеяния на неоднородностях решетки электроны рассеиваются при столкновении с фононами. Взаимодействие электронов с фононами приводит к тому, что резкая ступенька в распределении Ферми размывается на интервал порядка kT (см. рис. 51): электроны приобретают малую добавку тепловой энергии. Теперь при рассеянии на фононах и друг на друге электроны могут обмениваться добавочной энергией $\sim kT$. В состоянии термодинамического равновесия тепловые энергии фермиевских электронов и решетки равны между собой.

Электроны могут изменить энергию (получить добавочную энергию к энергии Ферми) и при абсолютном нуле, например под действием электрического поля. Если при нагревании кристалла решетка «нагревала» электронный газ, то в электрическом поле, наоборот, электроны приобретают дополнительную энергию и передают ее при рассеянии решетке, генерируя фононы.

Каждая частица в течение времени релаксации может испытывать несколько последовательных взаимодействий. Иными словами, может иметь место ситуация, при которой частица в единичном акте рассеяния передает лишь часть приобретенной энергии и для того, чтобы вернуться в невозбужденное состояние, ей необходимо несколько раз провзаимодействовать с другими частицами. Естественно, что могут быть и такие процессы, при которых частице достаточно одного соударения, чтобы вернуться в невозбужденное состояние. Характер процесса релаксации зависит от соотношения между энергиями и импульсами сталкивающихся частиц и от степени неупругости рассеяния. В том случае, когда τ определяется временем между двумя последовательными актами рассеяния (иными словами, когда каждый единичный акт рассеяния весьма эффективен), частица движется в течение этого времени на длине l как свободная, не изменяя своего состояния. В тех же случаях, когда за время τ частица испытывает много последовательных соударений (т. е. когда эффективность единичного акта рассеяния весьма низкая), состояние частицы на длине свободного пробега непрерывно меняется. В этом случае движение частицы в решетке подобно движению в вязкой среде, при котором электрон теряет энергию (или меняет импульс) практически непрерывно. Величину, обратную l , можно рассматривать при этом как меру вязкости среды, определяемую скоростью передачи энергии (импульса) от электрона к фононам на единице длины пути при движении вдоль некоторой оси x : $\Gamma^{-1} \sim \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$.

Это означает, что только на длине пути $\Delta x \ll l$ можно пренебречь изменением состояния электрона и считать, что на таком интервале электрон движется как свободная частица.

Когда говорится о средней длине l свободного пробега, надо иметь в виду, что в металле имеются электроны как со значительно меньшей, так и значительно большей длиной свободного пробега, чем l . Поэтому даже в том случае, когда условие $l < \xi$ (ξ — некоторый характерный размер в кристалле) не выполняется, в металле имеется небольшая группа электронов, для которой это условие выполнено и они могут вносить вклад в наблюдаемые эффекты.

Величина времени релаксации при данном значении энергии частицы определяет также границы применимости понятия квазичастицы при описании энергетического спектра электронов в твердых телах. Действительно, на основании соотношения неопределенностей Гейзенберга ($\Delta \varepsilon \cdot \tau \gtrsim \hbar$) можно говорить о конкретной энергии и импульсе электрона лишь при условии, что неопреде-

ленность $\Delta\varepsilon$ энергии, связанная с конечным временем жизни τ элементарного возбуждения, много меньше самой энергии элементарного возбуждения $\varepsilon(\mathbf{p})$. В сильно неупорядоченных системах, когда длина свободного пробега $l=v_F\tau$ электрона уменьшается до величины межатомных расстояний a , неопределенность энергии достигает

$$\Delta\varepsilon \sim \frac{\hbar}{l} v_F \sim \frac{10^{-27} \cdot 10^{18}}{10^{-8}} \sim 10^{-11} \text{ эрг} \sim 6 \text{ эВ},$$

т. е. неопределенность энергии не только превышает энергию $\varepsilon(\mathbf{p})$, но по порядку величины сравнивается с энергией Ферми ε_F . В этом случае само представление о поверхности Ферми теряет смысл.

§ 2. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ФОНОНАХ

Физически природа взаимодействия электронов с фононами заключается в следующем. Фонон представляет собой распространяющуюся в решетке волну упругой деформации, которая создает в решетке чередующиеся области сжатия и разряжения. В результате этого в решетке возникает дополнительный периодический потенциал, на котором рассеиваются электроны.

Эффективность рассеяния электрона на фононах определяется эффективностью элементарного акта взаимодействия и числом рассеивающих центров, т. е. числом фононов, с которыми электрон может взаимодействовать.

Наиболее эффективно электроны рассеиваются на продольных фононах. Взаимодействие электронов с поперечными фононами малоэффективно, так как сдвиговые волны, которым соответствуют поперечные колебания, создают лишь слабую модуляцию плотности и, следовательно, потенциала в решетке.

Эффективность взаимодействия электронов с фононами уменьшается при увеличении длины волны фонона λ_q . Этот эффект связан с тем, что при увеличении λ_q растут размеры областей сжатия и разряжения в решетке и при одной и той же амплитуде колебаний уменьшается градиент потенциала, а следовательно, и силы, действующие на электроны. Таким образом, при $\lambda_q \rightarrow \infty$ эффективность электрон-фононного взаимодействия должна стремиться к нулю.

Из квантовомеханического рассмотрения следует, что вероятность w взаимодействия электрона с фононом, определяется квадратом матричного элемента оператора электрон-фононного взаимодействия $\hat{\mathcal{H}}_{e-ph}(\mathbf{q})$, вычисленного на блоховских функциях электронов в зоне проводимости: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Для металла, решетка которого состоит из атомов одного сорта с массой M , взаимодействие электрона с продольным фононом с вол-

новым вектором $q \left(q = \frac{2\pi}{\lambda_q} \right)$ и частотой ω_q описывается оператором вида

$$\hat{\mathcal{H}}_{e-ph}(q) = iqC_1 \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_q} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar\omega_q}{kT} - 1}} e^{iqr}, \quad (4.1)$$

где C_1 — первая константа деформационного потенциала. Первой константой деформационного потенциала называется коэффициент пропорциональности C_1 (имеющий размерность энергии) между локальным изменением энергии Ферми электронов $\delta\epsilon_F(r) = \epsilon_F(r) - \epsilon_F^0$ и относительным изменением элементарного объема кристалла $\delta V/V$, возникающим в результате деформации решетки при распространении в ней продольной волны упругих напряжений (звуковой волны):

$$\delta\epsilon_F(r) = \epsilon_F(r) - \epsilon_F^0 = C_1 \frac{\delta V}{V}, \quad (4.2)$$

где ϵ_F^0 — невозмущенное значение энергии Ферми. Поскольку ϵ_F увеличивается при локальном сжатии кристалла, то C_1 является отрицательной величиной; по абсолютному значению C_1 близка к энергии Ферми. В частности, для изотропного металла со сферической поверхностью Ферми $C_1 = -\frac{2}{3}\epsilon_F^0$. В общем случае имеет место соотношение

$$\delta\epsilon_F(r) = C_1 \operatorname{div} u(r), \quad (4.3)$$

где $u(r)$ — вектор локального смещения частиц среды при распространении волны упругих напряжений. Константа C_1 является характеристикой металла; она определяется на основе акустических измерений коэффициента затухания звука в металле. Матричный элемент $\Lambda_{k,k'}$ оператора $\hat{\mathcal{H}}_{e-ph}(q)$ (4.1) на блоховских функциях с волновыми векторами k и k' , соответствующих состояниям электрона до и после взаимодействия с фононом, равен

$$\Lambda_{k,k'}(q) = iC_1 \sqrt{\frac{q}{Mv_{зв\parallel}} \cdot \frac{1}{\frac{\hbar\omega_q}{kT} - 1}} \int u_k^*(r) u_{k'}(r) e^{i(k-k'+q)r} dr. \quad (4.4)$$

При получении (4.4) использован простейший закон дисперсии для длинноволновых продольных фононов: $\omega_q = v_{зв\parallel} q$. Поскольку для волнового вектора q фонона выполняется неравенство $q \ll 1/a$, где a — постоянная решетки, можно показать, что интеграл в (4.4) пропорционален δ -функции $\delta(k-k'+q)$, которая обеспечивает выполнение закона сохранения импульса при взаимодействии электрона с фононом. Таким образом, вероятность w_q вза-

взаимодействия электрона с длинноволновым продольным фононом с волновым вектором q пропорциональна:

$$\omega_q \sim \frac{qC_1^2}{Mv_{\text{эф}} \parallel} \frac{1}{\frac{\hbar\omega_q}{e kT} - 1} \sim \frac{1}{\lambda_q}. \quad (4.5)$$

Полная вероятность ω электрон-фононного взаимодействия определяется интегралом по всем q :

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \int |\Lambda_{k,k'}(q)|^2 \frac{dq}{(2\pi)^3}. \quad (4.6)$$

Как уже отмечалось выше, взаимодействие электронов с поперечными фононами менее эффективно, чем с продольными. Это связано с тем, что изменение элементарного объема при сдвиговых деформациях возникает только во втором порядке по малому вектору элементарного смещения $u(r)$. Вследствие этого взаимодействие электронов с поперечными фононами появляется только во втором порядке теории возмущений, тогда как взаимодействие электронов с продольными фононами — эффект первого порядка.

Число фононов, с которыми могут взаимодействовать электроны, ограничивается законами сохранения энергии и импульса: для каждого электрона существует лишь определенная группа фононов, на которых он может рассеиваться.

В зависимости от соотношения волновых векторов электрона и фонона или рассеяние может происходить в пределах одной зоны Бриллюэна (такие процессы называются нормальными или N -процессами), или же волновой вектор электрона после взаимодействия с фононом может попадать в соседние зоны (такие процессы называются процессами переброса или U -процессами от немецкого слова *Umklapp* — переброс). N -процессы рассеяния, при которых электрон из состояния с волновым вектором k переходит в состояние с волновым вектором k' , удовлетворяют законам сохранения энергии и квазиимпульса в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varepsilon(k') &= \varepsilon(k) + \hbar\omega_q, \\ \hbar k' &= \hbar k + \hbar q. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Пусть электрон с волновым вектором k до взаимодействия находился на изоэнергетической поверхности вблизи уровня Ферми ($\varepsilon = \varepsilon(k)$). Предположим, что после взаимодействия с фононом с энергией $\hbar\omega_q$ электрон переходит в более высокое энергетическое состояние $\varepsilon(k')$, отличающееся от предыдущего на энергию фонона $\hbar\omega_q$ (рис. 141).

Для того чтобы найти разрешенные значения векторов фононов с энергией $\hbar\omega_q$, которые могут взаимодействовать с задан-

ным электроном (k), вспомним, что энергии $\hbar\omega_q$ в фазовом пространстве отвечают три поверхности постоянной частоты

$$\omega(q) = \omega_L, \quad \omega(q) = \omega_{T_1}, \quad \omega(q) = \omega_{T_2},$$

для продольных и поперечных фононов, форма которых определяется законом дисперсии фононов в кристалле. Выберем одну из них, например $\omega(q) = \omega_L$. Поместим начало координат этой поверхности в конец вектора k . Линия пересечения поверхностей $\varepsilon = \varepsilon(k) + \hbar\omega$ и $\omega(q) = \omega_L$ и определит геометрическое место точек, задающих разрешенные значения векторов фононов с энергией $\hbar\omega_L$, удовлетворяющих одновременно законам сохранения энергии и импульса (4.7).

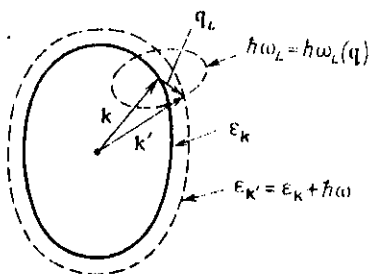


Рис. 141

Таим образом, задание энергии фононов $\hbar\omega_q$ определяет в общем случае три группы фононов (продольных и поперечных), с которыми электрон (k) может взаимодействовать. Волновые вектора q_L , q_{T_1} и q_{T_2} этих фононов соединяют конец вектора k с любыми точками на линиях пересечения поверхностей $\varepsilon = \varepsilon(k) + \hbar\omega$; $\omega = \omega(q_L)$; $\omega = \omega(q_{T_1})$ и $\omega = \omega(q_{T_2})$.

При изменении энергии фононов $\hbar\omega$ изменяется (расширяется или сжимается) энергетическая поверхность $\varepsilon(k') = \varepsilon(k) + \hbar\omega$ и одновременно деформируются поверхности $\omega = \omega(q_s)$ ($s = L, T_1, T_2$). Пусть, например, энергия фононов уменьшается. В результате сжатия поверхностей $\varepsilon = \varepsilon(k')$ и $\omega = \omega(q)$ линии их пересечения описывают в фазовом пространстве воронкообразные поверхности S с вершиной в конце вектора k . Эти поверхности задают геометрическое место точек, определяющих набор волновых векторов фононов, т. е. число фононов данной поляризации, на которых может рассеиваться электрон с волновым вектором k .

Рассеяние, сопровождающееся процессами переброса, принципиально отличается от нормального рассеяния. Процесс переброса открывает дополнительный канал рассеяния, который не описывается условиями (4.7). В процессах переброса электрон в дополнение к волновому вектору q фонона может приобрести или потерять волновой вектор $2\pi g$, где g — вектор обратной решетки. Поэтому рассеяние с перебросом удовлетворяет законам сохранения энергии и квазиимпульса в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon(k') &= \varepsilon(k) + \hbar\omega_q, \\ \hbar k' &= \hbar k + \hbar q + 2\pi \hbar g. \end{aligned} \quad (4.8)$$

При процессах переброса избыточный квазиимпульс $2\pi \hbar g$ передается кристаллу как целому. Процессы переброса можно рассматривать как процессы, сопровождающиеся рождением или по-

глошением фонона электроном с одновременным брэгговским отражением.

При заданном значении волнового вектора k условиям (4.8) удовлетворяют фононы с волновыми векторами q , соединяющими конец вектора k с геометрическим местом точек, образующимся при пересечении поверхности $\omega=\omega(q)$ с изоэнергетической по-

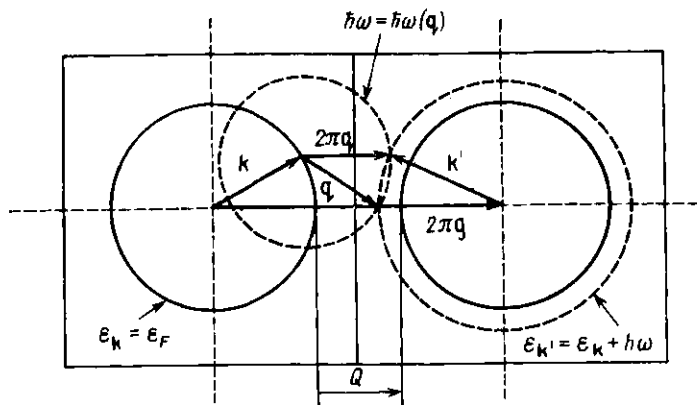


Рис. 142

верхностью $\varepsilon(k')=\varepsilon(k)+\hbar\omega$ (рис. 142). При уменьшении ω поверхность $\varepsilon(k)+\hbar\omega$ сжимается и одновременно уменьшается поверхность постоянной частоты

$$\omega=\omega(q).$$

В рассматриваемом случае в отличие от N -процессов пересечение поверхностей $\omega=\omega(q)$ и $\varepsilon=\varepsilon(k')$ исчезает при некотором конечном значении $|q|=Q$. Поэтому линия пересечения этих поверхностей образует при уменьшении q «воронкообразную» поверхность разрешенных значений q . Площадь этой поверхности $S \approx \pi(q^2 - Q^2)$ зависит от $|q|$ и обращается в нуль при $|q|=Q$.

Чем ближе друг к другу расположены поверхности Ферми в соседних зонах Бриллюэна, тем при более низких температурах процессы переброса дают заметный вклад в рассеяние электронов. Например, у щелочных металлов фермиевский импульс лишь на 12% меньше расстояния от центра зоны до ее боковых граней. Поэтому у щелочных металлов рассеяние электронов на фононах с процессами переброса доминирует даже при температуре жидкого водорода (температура кипения жидкого водорода при нормальном давлении равна 20,4 K).

Интересно рассмотреть с этой точки зрения открытые поверхности Ферми. Для открытых поверхностей рассеяние с процессами переброса возможно при любых значениях импульса q , так как изоэнергетические поверхности непрерывно переходят из

одной зоны Бриллюэна в соседнюю (см., например, рис. 112). Поэтому у металлов с открытыми изоэнергетическими поверхностями рассеяние с перебросом сохраняется до самых низких температур. Однако относительная роль этого рассеяния оказывается чрезвычайно малой. Во-первых, в процессах переброса могут участвовать только электроны, расположенные на «шейках» изоэнергетической поверхности вблизи границ зоны Бриллюэна. Число таких электронов мало. Во-вторых, эти электроны могут рассеиваться только на фононах с импульсами q , ориентация которых близка к направлениям открытости (т. е. к продольным осям «шеек») поверхности Ферми. Число таких фононов также относительно мало. В результате вероятность рассеяния с перебросом при низких температурах составляет обычно ничтожно малую величину по сравнению с вероятностью нормальных процессов рассеяния.

§ 3. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТАХ

К точечным дефектам обычно относят локализованные в пространстве нарушения периодичности кристалла, имеющие атомные размеры: вакансии (узлы кристаллической решетки, в которых нет атомов), примеси замещения (химически чужеродные атомы, находящиеся в узлах кристаллической решетки на месте атомов матрицы), примеси внедрения (лишние атомы, не находящиеся в узлах решетки). При рассмотрении взаимодействия носителей с точечными дефектами необходимо учитывать электрические поля дефекта, обменные силы, деформацию кристаллической решетки в окрестности дефекта и магнитное взаимодействие носителя с магнитным моментом дефекта, если он не равен нулю. В полупроводниках основную роль играют электрические силы, которые из-за небольшого количества носителей слабо экранированы. В металлах из-за сильного экранирования вклады деформационного и кулоновского взаимодействия могут оказаться сравнимыми.

Вероятность рассеяния на точечном дефекте определяется эффективным сечением рассеяния, которое по определению равно площади S^* непрозрачного экрана, вероятность рассеяния частиц на котором равна вероятности рассеяния на точечном дефекте. Пусть в элемент телесного угла $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ на участке dx в единицу времени рассеиваются dq частиц. Это число можно представить в виде

$$dq = q \cdot N \cdot dx \cdot \sigma(\theta, \varphi) d\Omega, \quad (4.9)$$

где q — концентрация рассеивающихся частиц, N — концентрация рассеивающих центров. Величина $\sigma(\theta, \varphi)$, численно равная числу частиц dq , рассеянных за единицу времени в единичный телесный угол на единичном участке пути для единичного потока на одном рассеивающем центре, называется дифференциальным

эффективным сечением. Как и эффективное сечение S^* , оно имеет размерность площади. S^* и $\sigma(\theta, \varphi)$ связаны соотношением

$$S^* = \int_{(4\pi)} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega. \quad (4.10)$$

Поэтому величину S^* иногда называют интегральным эффективным сечением.

Для изотропного рассеяния, когда $\sigma(\theta, \varphi)$ не зависит от углов, справедливо соотношение

$$S^* = 4\pi\sigma. \quad (4.11)$$

Если рассеивающий центр обладает осевой симметрией, то σ зависит только от полярного угла θ и определяет вероятность рассеяния в телесный угол, заключенный между двумя конусами θ и $\theta + d\theta$ (рис. 143) и равный $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$.

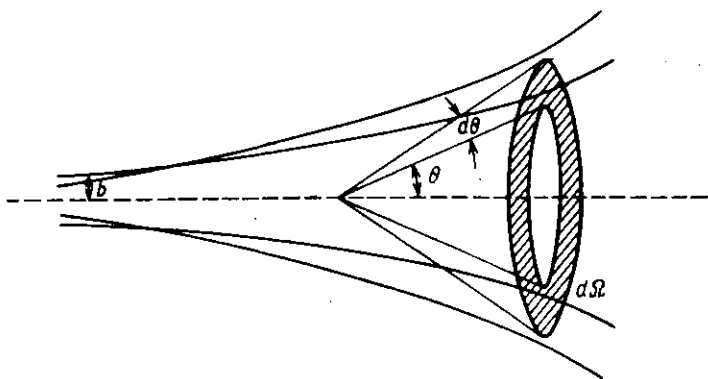


Рис. 143

При столкновении легкой частицы с тяжелым неподвижным рассеивающим центром энергия частицы практически не меняется и рассеяние является с хорошей точностью упругим. Такой процесс имеет место, если при взаимодействии частицы с рассеивающим центром не происходит возбуждения внутренних степеней свободы центра. В этом случае нетрудно показать, что доля энергии $\delta\epsilon$, передаваемая центру с массой M от рассеивающейся легкой частицы с массой m ($m \ll M$), равна нулю при рассеянии на угол $\theta = 0$. Максимальная передача энергии имеет место при рассеянии назад ($\theta = \pi$, частица «отражается» назад рассеивающим центром) и составляет

$$\delta\epsilon = \delta\epsilon_{\max} = \frac{4m}{M} \epsilon, \quad (4.12)$$

где ϵ — первоначальная энергия частицы. Средняя энергия, пе-

редаваемая частицей центру рассеяния за одно столкновение $\langle \delta \epsilon \rangle$, составляет:

$$\langle \delta \epsilon \rangle = \frac{2m}{M} \cdot e \cdot \frac{\sigma_c}{S^*}, \quad (4.13)$$

где через σ_c обозначена величина

$$\sigma_c = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta, \quad (4.14)$$

которая называется усредненным дифференциальным сечением. При изотропном рассеянии ($\sigma(\theta) = \text{const}$)

$$\sigma_c = 4\pi\sigma = S^*. \quad (4.15)$$

Следовательно, при изотропном рассеянии

$$\langle \delta \epsilon \rangle = \frac{2m}{M} \epsilon. \quad (4.16)$$

Для процессов электропроводности весьма существенна величина ν числа столкновений, в результате которых скорость направленного движения теряется полностью. Можно показать, что при изотропном рассеянии скорость полностью теряется при одном столкновении ($\nu=1$). В общем случае $\nu = S^*/\sigma_c$. Величина σ_c является весьма важной характеристикой упругого рассеяния.

Так, при упругом рассеянии электронов σ_c определяет величину времени релаксации и длины свободного пробега для частиц на поверхности Ферми:

$$\tau_p(k) = \frac{1}{\sigma_c \cdot N \cdot v_F(k)}, \quad (4.17)$$

$$l_p(k) = v_F(k) \tau_p(k) = \frac{1}{\sigma_c \cdot N}.$$

1. Рассеяние электронов на заряженных примесных центрах

Рассмотрим рассеяние электронов на заряженных центрах с экранированным потенциалом

$$V(r) = \pm \frac{Ze^2}{\kappa r} e^{-r/r_D}, \quad (4.18)$$

где r_D — радиус экранирования, знак «плюс» относится к случаю, когда заряд рассеивающего иона отрицательный, а «минус» — положительный. При $r_D \rightarrow \infty$ потенциал (4.18) соответствует кулоновскому полю заряда Ze . Согласно квантовой теории рассеяния дифференциальное эффективное сечение рассеяния электрона на центре с потенциалом $V(r)$ равно

$$\sigma(\theta, \varphi) = \left| \frac{2m^*}{\hbar^2} \int_0^\infty r \cdot V(r) \frac{\sin \alpha r}{\alpha} dr \right|^2, \quad (4.19)$$

где $\alpha = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ ($\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ — волновые вектора электрона до и после рассеяния), m^* — эффективная масса электрона. При упругом рассеянии $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, $\alpha = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, где θ — угол рассеяния (рис. 144). Вычисления дают

$$\sigma(\theta, \varphi) = \sigma(0) = 4 \left(\frac{Ze^2 m^*}{\kappa \hbar^2} \right)^2 \left[\left(\frac{1}{r_D} \right)^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right]^{-2}. \quad (4.20)$$

Для незранированного потенциала ($r_D \rightarrow \infty$) выражение (4.20) имеет вид

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4} \left(\frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \right)^2 \left[\sin \frac{\theta}{2} \right]^{-4}, \quad (4.21)$$

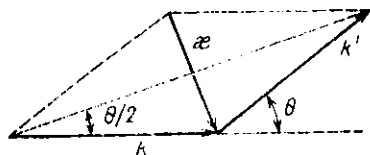


Рис. 144

совпадающий с известной формулой Резерфорда, полученной для описания рассеяния α -частиц в поле ядер.

Вычисление S^* и σ_c на основе формулы (4.21) приводит к расходимости. Это связано с тем обстоятельством, что малым углам отклонения соответствуют сколь угодно большие прицельные расстояния b . Однако в твердом теле нет необходимости рассматривать значения b , существенно превосходящие среднее расстояние $N^{-1/3}$ между рассеивателями. Если выбрать, в качестве верхнего предела для b величину $b_{\max} = \frac{1}{2} N^{-1/3}$, которому соответствует минимальное значение угла рассеяния

$$\theta_{\min} = 2 \arctg \left(\frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \frac{2}{N^{-1/3}} \right), \quad \text{то}$$

получаются конечные значения для S^* и σ_c :

$$S^* = \pi \left(\frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \right)^2 \left(\sin^{-2} \frac{\theta_{\min}}{2} - 1 \right), \quad (4.22)$$

$$\sigma_c = -4\pi \left(\frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \right)^2 \ln \left(\sin \frac{\theta_{\min}}{2} \right). \quad (4.23)$$

Эти же величины можно выразить через $b_{\max} = \frac{1}{2} N^{-1/3}$:

$$S^* = \pi \left(\frac{N^{-1/3}}{2} \right)^2 = \pi b_{\max}^2, \quad (4.24)$$

$$\sigma_c = 2\pi \left(\frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \right)^2 \ln \left[1 + \frac{1}{4N^{2/3}} \left(\frac{\kappa m^* v^2}{Ze^2} \right)^2 \right]. \quad (4.25)$$

Если параметр $\delta = \frac{1}{4N^{2/3}} \left[\frac{\kappa m^* v^2}{Ze^2} \right]^2$ мал, то эффективное сечение

рассеяния не зависит от скорости и энергии частиц. Малость этого параметра означает, что кинетическая энергия частицы E мала по сравнению с кулоновским потенциалом V на расстоянии, равном $2b_{\max}$ от центра:

$$V(2b_{\max}) = \frac{Ze^2}{\kappa N^{-1/3}} \quad (r_D \rightarrow \infty).$$

Время релаксации по импульсу $\tau_p(\varepsilon)$ при рассеянии на неэкранированных кулоновских центрах составляет

$$\tau_p(\varepsilon) = \frac{1}{v_F(\varepsilon) \sigma_c N} = \kappa^2 m^* v_F^3 \left\{ 2\pi N Z^2 e^4 \ln \left[1 + \left(\frac{\kappa m^* v_F^2}{2N^{1/3} Ze^2} \right)^2 \right] \right\}^{-1}. \quad (4.26)$$

Последнее выражение носит название формулы Копуэлла—Вайскопфа. Из него следует, что основная зависимость времени релаксации от энергии частиц ε имеет вид

$$\tau_p(\varepsilon) \simeq \tau_0 \varepsilon^{3/2}. \quad (4.27)$$

При $\varepsilon \rightarrow 0$ формула (4.27) неприменима. При малых ε она должна быть заменена выражением

$$\tau_p(\varepsilon) = \frac{m^{*1/2}}{\sqrt{2} \pi N^{1/3}} \varepsilon^{-1/2}. \quad (4.28)$$

Учет конечного радиуса экранирования r_D заряженных центров дает иное выражение для $\sigma(\theta)$:

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{\kappa m^* v^2} \right)^{1/2} \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \xi^{-2} \right)^{-2}, \quad (4.29)$$

где $\xi = 2\kappa r_D$. При этом транспортное время релаксации по импульсу τ_p определяется формулой, аналогичной (4.26), в которой

$$\ln \left[1 + \left(\frac{\kappa m^* v^2}{2N^{1/3} Ze^2} \right)^2 \right]$$

заменен выражением

$$\ln(1 + \xi^2) - \frac{\xi^2}{4 + \xi^2}.$$

Получающаяся при этом формула для $\tau_p(\varepsilon)$ носит название формулы Брукса—Херринга. Справедливость формулы Брукса—Херринга ограничена рядом предположений. Часть из них связана с возможностью использования экранированного кулоновского потенциала в качестве потенциала заряженной примеси. Это возможно при двух условиях. Во-первых, экранирующий газ должен быть близок к идеальному, т. е. для его частиц должен быть мал так называемый газовый параметр χ , равный отношению кулоновской энергии взаимодействия двух носителей на среднем расстоянии $n^{-1/3}$ и кинетической энергии (равной ε_F или kT):

$$\chi = e^2 n^{1/3} / \kappa kT \quad \text{или} \quad \chi = e^2 n^{1/3} / \kappa \varepsilon_F. \quad (4.30)$$

Во-вторых, должен быть достаточно слабым возмущающий (рассеивающий) потенциал $V = \frac{Ze^2}{\kappa r} e^{-r/r_D}$ на расстоянии радиуса экранирования $r = r_D$ по сравнению с энергией тепловых колебаний:

$$\frac{Ze^2}{\kappa r_D} e^{-1} \ll kT. \quad (4.31)$$

Наконец, еще одно ограничение связано с борновским приближением, в рамках которого получена формула Брукса—Херринга:

$$r_D \ll r_B, \text{ если } \xi \ll 1;$$

$$k^{-1} \ll r_B, \text{ если } \xi \gg 1$$

($r_B = \frac{\kappa \hbar^2}{m^* e^2}$ — эффективный радиус первой борновской орбиты).

2. Рассеяние электронов на нейтральных атомах примеси

Рассеяние носителей заряда на нейтральных примесях можно описать формулами, полученными для заряженных сильно экранированных центров. Для атома нейтральной примеси эффективный радиус экранировки заряда ядра составляет величину $r_D \sim 10^{-8}$ см, так что практически для всех носителей заряда можно пренебречь величиной k^2 по сравнению с r_D^{-2} . В связи с этим формулы $\sigma(\theta)$ и σ_c упрощаются и переходят в выражения

$$\sigma(\theta) = 4 \left(\frac{Ze^2 m^*}{\kappa \hbar^2} r_D^2 \right)^2, \quad (4.32)$$

$$\sigma_c = 8\pi \left(\frac{Ze^2 m^*}{\kappa \hbar^2} r_D^2 \right)^2. \quad (4.33)$$

Таким образом, рассеяние электронов на нейтральных примесях изотропно, а σ и σ_c не зависят от энергии рассеивающихся частиц.

Оценим величину σ , полагая $m^* \simeq m_0$, $\kappa \simeq 10$, $Z=1$, $r_D \sim 10^{-8}$ см. Оценка дает $\sigma \simeq 2 \cdot 10^{-17}$ см². Время релаксации τ_p при рассеянии на нейтральных примесях равно

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_c v N} = \frac{1}{\sqrt{2} \pi N} \left(\frac{\kappa \hbar^2}{Ze^2 r_D^2} \right)^2 \frac{e^{-1/2}}{m^{*3/2}}, \quad (4.34)$$

где N — концентрация примесей. Полученные выше выражения справедливы в том случае, если рассеивающаяся частица не влияет на поле рассеивающего центра. В действительности это не так. Свободный носитель заряда своим полем поляризует атом примеси, вследствие чего у атома примеси появляется индуцированный дипольный момент, который в свою очередь создает электрическое поле, действующее на свободный заряд. Потенци-

альная энергия свободного носителя в поле индуцированного им диполя имеет вид

$$U = -\frac{\xi e^2}{2\kappa^2 r^4}, \quad (4.35)$$

где ξ — поляризуемость атома примеси. Дифференциальное эффективное сечение рассеяния на потенциале (4.35) равно

$$\sigma = \frac{4m^{*2}\xi^2 e^4}{\hbar^4 4\kappa^2 R_0^2} = \left(\frac{\xi m^* e^2}{\hbar^2 R_0} \right)^2. \quad (4.36)$$

Здесь R_0 — некоторое минимальное расстояние, до которого справедливо выражение (4.35) для потенциала. Итак, при малой энергии носителей заряда, когда $kR_0 \ll 1$, дифференциальное эффективное сечение (4.36) рассеяния на поляризационном потенциале изотропно и явно не зависит от энергии. С ростом энергии рассеиваемой частицы изотропное рассеяние на нейтральных центрах становится резко анизотропным: рассеяние происходит только внутри конуса с угловым раствором $\Delta\theta \sim (kR_0)^{-1}$ и вне этого конуса рассеяние практически отсутствует.

В действительности все обстоит еще более сложно. При рассеянии электрона на нейтральном центре вследствие тождественности рассеиваемого электрона и электрона атома возможен обменный эффект. Кроме того, водородоподобный рассеивающий центр имеет целый ряд возбужденных состояний, вследствие чего рассеяние может быть неупругим.

Это означает, что задача о рассеянии электронов нейтральными примесями значительно сложнее соответствующей задачи с заряженными примесями. При упругом рассеянии электронов на нейтральных водородоподобных примесях в простейшем случае $\sigma \sim v^{-1}$ и время релаксации τ_p не зависит от энергии рассеиваемых частиц. Для оценки τ_p обычно используется приближенное соотношение

$$\tau_p = \frac{m^* e^2}{20\kappa \hbar^2 N}, \quad (4.37)$$

где N — концентрация примесей. Необходимо отметить, что электрическая активная примесь может быть нейтральной только при очень низких температурах. Укажем также, что при рассеянии на дислокациях эффективное сечение рассеяния существенно зависит от угла между начальной скоростью носителей заряда и осью дислокаций. Можно показать, что при рассеянии на линейных дислокациях выражение для времени релаксации τ_p имеет вид

$$\tau_p = \frac{3}{8} \cdot \frac{1}{v R_d N_D}, \quad (4.38)$$

где R_d — радиус, а N_D — поверхностная плотность дислокаций.

§ 4. ОСОБЕННОСТИ РЕЛАКСАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ НАЛИЧИИ ДВУХ КАНАЛОВ РАССЕЙНИЯ: УПРУГОГО И НЕУПРУГОГО

Для того чтобы продемонстрировать при каких обстоятельствах и как упругий и неупругий каналы рассеяния влияют друг на друга, проанализируем конкретный пример рассеяния электронов в металле на фононах (неупругий канал) и на заряженных примесях (упругий канал) при различных температурах. На этом примере проследим за изменением характера релаксации электронов при понижении температуры при наличии двух качественно различных каналов рассеяния.

Из эксперимента известно, что в области не слишком низких температур сопротивление металла с примесями ведет себя в соответствии с так называемым правилом Матиссена, согласно которому сопротивление ρ может быть представлено в виде суммы двух частей: зависящего от температуры сопротивления идеального беспримесного металла $\rho_{ид}(T)$, которое при $T \ll \theta_D$ описывается законом Блоха—Грюнайзена $\rho_{ид}(T) \sim T^5$ и стремится к нулю при $T \rightarrow 0$, и не зависящего от температуры остаточного сопротивления ρ_0 , которое полностью определяется концентрацией примесей:

$$\rho = \rho_0 + \rho_{ид}(T). \quad (4.39)$$

Справедливость правила Матиссена означает, что процессы рассеяния электронов на фононах и примесях являются статистически независимыми, в результате чего полная вероятность рассеяния электрона $\omega = 1/\tau$ равна сумме вероятностей рассеяния в каждом канале в отдельности:

$$\omega = 1/\tau = \omega_{ph} + \omega_i, \quad (4.40)$$

где $\omega_{ph} = 1/\tau_{ph}$ — зависящая от температуры вероятность рассеяния на фононах и $\omega_i = 1/\tau_i$ — независящая от температуры вероятность рассеяния на примесях (τ_{ph} и τ_i — соответствующие времена релаксации). Действительно, в этом случае сопротивление ρ металла равно сумме сопротивлений, вычисленных для каждого канала в отдельности. Это нетрудно показать с помощью формулы Друде—Лоренца для $\sigma = 1/\rho$:

$$\rho = \frac{m^*}{e^2 n \tau} = \frac{m^*}{e^2 n} \left(\frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{ph}} \right) = \rho_0 + \rho_{ид}(T). \quad (4.41)$$

Напомним, что зависимость $\rho_{ид}(T) \sim T^5$ при $T \ll \theta_D$ возникает как произведение числа рассеивателей (фононов) $N_{ph} \sim T^3$ и эффективности каждого акта взаимодействия с фононом $\sim (T/\theta_D)^2$. Низкая эффективность взаимодействия электрона с фононом связана с тем, что в этой области температур импульс фонона $\hbar q \sim kT/v_{zv}$ мал по сравнению с фермиевским импульсом электрона $p_F \sim \hbar/a \sim \sim k\theta_D/v_{zv}$, в результате чего для изменения импульса электрона на величину порядка p_F необходимо $\sim (\theta_D/T)^2$ последовательных взаимодействий с отдельными фононами.

Существуют две, практически адекватные, схемы описания электронов проводимости.

Первая — это система блоховских плоских волн, вторая — система волновых пакетов, каждый из которых характеризуется зарядом — e , массой m^* , скоростью распространения $\sim v_F$ и импульсом p_F . Энергия и импульс волнового пакета связаны с частотой ω_e и волновым вектором k_F соответствующей плоской

волны соотношениями
$$e_F = \frac{m^* v_F^2}{2} = \hbar \omega_e, \quad p_F = \hbar k_F = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_B}.$$
 Аналогичные представления можно применить при рассмотрении фононов. С этой стороны — это совокупность плоских упругих волн с частотами ω_q и волновыми векторами q , распространяющихся в решетке со скоростью звука $v_{зв}$.

С другой стороны, каждой упругой волне с частотой ω_q и волновым вектором q можно сопоставить волновой пакет — флуктуацию электростатического потенциала решетки, — распространяющийся в решетке со скоростью звука и переносящий энергию и импульс, связанные с частотой и волновым вектором соответствующей упругой волны такими же, как и для электрона, соотношениями:

$$\epsilon_q = \hbar \omega_q, \quad p_q = \hbar q = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_{ph}}.$$

Второй подход позволяет рассматривать рассеяние электронов на фононах как процесс взаимодействия заряженной частицы с электростатическим потенциалом, локализованным в объеме фононного волнового пакета, размеры которого определяются длиной волны фонона λ_{ph} .

Заметим, что размеры фононного волнового пакета при $T > \theta_D$ определяются величиной $\lambda_{ph} \sim 2a$ и близки к размеру волнового пакета для фермиевского электрона с размерами

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{p_F} \sim \frac{2\pi\hbar}{\hbar/a} = 2\pi a.$$

При понижении температуры размер фононного волнового пакета увеличивается по закону $\lambda_{ph} \sim T^{-1}$ (действительно $\hbar \omega_q = \hbar v_{зв} q \sim kT$, откуда $q \sim T$, а $\lambda_{ph} \sim T^{-1}$), а электронного — не меняется. Поэтому при низких температурах рассеяние электрона на фононе следует рассматривать как рассеяние частицы малых размеров на заряде, размазанном в пространстве значительно большего размера.

Время взаимодействия $\tau_{e-ph}^{(1)}$ электрона с фононом в этом случае по порядку величины равно времени, за которое электрон пролетает расстояние, равное половине длины волны фонона:

$$\tau_{e-ph}^{(1)} \sim \lambda_{ph}/2v_F = \pi/qv_F \sim \pi\hbar v_{зв}/v_F kT. \quad (4.42)$$

Оценка (4.42) верна при условии, что на длине λ_{ph} электрон движется как свободная частица, т. е. при $l_i > \lambda_{ph}$, где l_i — длина

свободного пробега электрона, определяемая рассеянием на примесях. При понижении температуры неравенство $l_i > l_{ph}$ нарушится, поскольку длина волны фонона растет, как T^{-1} . Таким образом, описанный выше режим взаимодействия электрона с фононом в течение времени $\tau_{e-ph}^{(1)}$ (4.42) имеет место только при температурах выше некоторого характеристического значения T_1 , при котором λ_{ph} сравнивается с l_i :

$$T_1 = \frac{2\pi\hbar v_{зв}}{kl_i} = 2\pi \frac{a}{l_i} \theta_D. \quad (4.43)$$

По мере возрастания концентрации примесей l_i уменьшается и в пределе грязного металла стремится к величине межатомного расстояния a . При этом пограничная температура T_1 возрастает до величины $\sim \theta_D$.

При $T \ll T_1$ выполняется обратное неравенство $\lambda_{ph} \gg l_i$ и электрон в области $\sim \lambda_{ph}$ движется как броуновская частица, испытывая многократные упругие рассеяния на примесях. При этом движение электрона в области $\sim \lambda_{ph}$ носит диффузионный характер с шагом $\sim l_i$ и коэффициентом диффузии $D = \frac{1}{3} v_F l_i$. Это приводит к значительному возрастанию времени, которое электрон проводит в области $\sim \lambda_{ph}$, и, следовательно, к возрастанию времени взаимодействия электрона с фононом $\tau_{e-ph}^{(2)}$. Очевидно, при $T \ll T_1$

$$\tau_{e-ph}^{(2)} \sim \frac{\lambda_{ph}^2}{4D} \sim \frac{3\pi^2 \hbar^2 v_{зв}^2}{k^2 T^2 v_F l_i}. \quad (4.44)$$

время взаимодействия возрастает как T^{-2} , а не T^{-1} , как то было при $T > T_1$.

При переходе в область температур $T < T_1$ происходит не только возрастание времени взаимодействия, но и качественное изменение характера движения электрона. Это связано с тем обстоятельством, что при упругих взаимодействиях электрона с примесями в области пространства $\sim \lambda_{ph}$ не происходит изменения энергии электрона, а следовательно, фазы его волновой функции. В этом случае электронные волны де Бройля, распространяющиеся по различным путям в области $\sim \lambda_{ph}$, остаются когерентными и могут интерферировать друг с другом. Такой интерференционный характер движения электрона описывается квантовыми поправками к классической формуле Друде—Лоренца для проводимости, основанной на кинетическом уравнении Больцмана, и рассматривается в следующем параграфе. Здесь же указано, что переход к области температур, в которой существенны квантовые поправки, имеет место в металле с любым числом примесей. В достаточно грязном металле граница этой области соответствует довольно высоким температурам $T_1 \sim \theta_D$, в весьма чистом металле при $l_i \gg a$ эта граница опускается до температур $T_1 \sim \frac{a}{l_i} \times \theta_D \ll \theta_D$. Если температура неограниченно понижается, любая

система с примесями неизбежно переходит в область квантовых поправок, связанных с интерференцией электронных волн. Подчеркнем, что при $T > T_1$ справедливо неравенство $\lambda_{ph} < l_i$ и в пределах длины свободного пробега l_i происходит сбой фазы электронной волны вследствие рассеяния на фононах. При таких условиях интерференция электронных волн не наблюдается и квантовые поправки к проводимости не возникают.

Когерентная ситуация, при которой возможна интерференция электронных волн, сохраняется до тех пор, пока время взаимодействия $\tau_{e-ph}^{(2)}$ оказывается меньше, чем пол-периода колебания волны, связанной с распространением фонона, поскольку по истечении этого времени фаза фононной волны меняется на обратную (происходит, как говорят, сбой фазы у фонона). Время сбой фазы у фонона $\tau_{\phi} \sim \pi/\omega_{\phi} \sim \pi\hbar/kT$ растет как $1/T$. Очевидно, что при понижении температуры величины $\tau_{e-ph}^{(2)} \sim T^{-2}$ сравнивается с $\tau_{\phi} \sim T^{-1}$ при некоторой граничной температуре T_2 , которая определяется выражением

$$T_2 \sim \frac{3\pi\hbar v_{zv}^2}{kv_F l_i} = \frac{3\pi\hbar v_{zv}}{ka} \cdot \frac{a}{l_i} \cdot \frac{v_{zv}}{v_F} \simeq \frac{3}{2} \frac{v_{zv}}{v_F} T_1. \quad (4.45)$$

Видно, что $T_2/T_1 \sim 3/2 v_{zv}/v_F \sim 10^{-3} \ll 1$. При температуре $T \sim T_2$ когерентный режим движения электрона, для которого характерно наличие квантовых поправок к проводимости, не меняется. Однако время взаимодействия электрона с фононом теперь определяется не временем диффузии в области $\sim \lambda_{ph}$, а временем сбой фазы фонона $\sim \pi/\omega_{\phi}$, которое имеет иную температурную зависимость.

§ 5. ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ К ПРОВОДИМОСТИ

Вычисление квантовых поправок к проводимости и другим физическим характеристикам металла проводится методами квантовой теории поля. Однако существуют простые физические рассуждения, которые дают возможность оценить поправки по порядку величины и определить их зависимость от температуры, частоты, магнитного поля и концентрации примесей. Излагаемый ниже подход к определению квантовых поправок был развит Хмельницким и Ларкиным. К его преимуществу относится то, что он позволяет выяснить физическую картину прохождения квантовых поправок и характера их зависимости от различных параметров. При рассмотрении квантовых поправок для простоты ограничимся случаем, когда релаксация носителей тока происходит на основе двух механизмов рассеяния — упругого (рассеяние на примесях) и неупругого (рассеяние на фононах). Для этой цели проанализируем релаксацию электронов в металлической системе размерности d ($d=3$ или 2), в которой длина свободного пробега l_i при рассеянии на примесях существенно превосходит де-брой-

левскую длину волны $\lambda_B: l_i \gg \hbar/p_F = \lambda_B/2\pi$. При таких условиях электрон ведет себя как квазиклассическая частица. Предположим, что электрон, испытывая рассеяние на примесях, переходит из точки A в точку B , двигаясь подобно броуновской частице. Он может при этом пройти по разным путям (рис. 145). Для определения вероятности w обнаружения электрона в точке B необходимо сложить комплексные волновые функции A_i , соответствующие движению электрона вдоль i -го пути, и найти квадрат модуля суммы:

$$w = \left| \sum_i A_i \right|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i^* A_j. \quad (4.46)$$

Первое слагаемое описывает сумму вероятностей прохождения каждого пути, а второе соответствует интерференции разных амплитуд. Выражение (4.46) для вероятности w описывает следующий процесс. Представим, что в точке A расположен источник, когерентно излучающий волновые пакеты, которые распространяются вдоль лучевых трубок толщиной $\sim \lambda_B$, которые начинаются в точке A и заканчиваются в точке B . Движение пакета вдоль трубки происходит диффузионным образом подобно движению частицы в вязкой среде, однако изменение фазы волнового пакета $\Delta\varphi_i$ вдоль i -й трубки определяется только ее длиной, поскольку при упругом рассеянии на примесях дополнительного изменения фазы (сбоя фазы) электронной волны не происходит.

Изменение фазы равно

$$\Delta\varphi_i = \frac{1}{\hbar A} \int_{(i)}^B p dl, \quad (4.47)$$

где интеграл берется вдоль i -й траектории. Заметим, что для большинства траекторий интерференция не важна, так как длины этих траекторий очень сильно отличаются (напомним, что $l_i \ll \lambda_B$) и поэтому сильно отличаются изменения фазы $\Delta\varphi_i$ волновой функции на этих траекториях. При суммировании (4.46) по всем траекториям интерференционный вклад обращается в нуль из-за осциллирующего характера слагаемых в сумме $\sum_{i \neq j} A_i^* A_j$, каждое из

которых пропорционально $\cos(\Delta\varphi_i - \Delta\varphi_j)$. Исключение составляют траектории с самопересечением (рис. 145). Каждой такой траектории можно сопоставить две волновые функции $A_i^{(1)}$ и $A_i^{(2)}$, отвечающие различным направлениям обхода замкнутой петли (по или против часовой стрелки). Амплитуды $A_i^{(1)}$ и $A_i^{(2)}$ оказы-

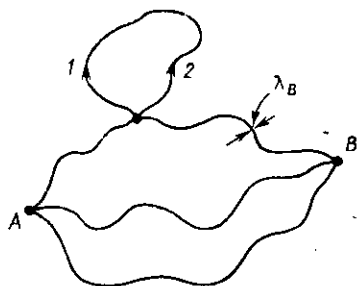


Рис. 145

ваются когерентными, поскольку при изменении направления движения в формуле (4.47) на обратное происходит замена $\mathbf{p}$ на $-\mathbf{p}$ и $d\mathbf{l}$ на $-d\mathbf{l}$, в результате чего изменения фазы $\Delta\varphi_i^{(1)}$ и $\Delta\varphi_i^{(2)}$ вдоль указанных траекторий одинаковы. В этом случае полная вероятность равна

$$|A_i^{(1)} + A_i^{(2)}|^2 = |A_i^{(1)}|^2 + |A_i^{(2)}|^2 + A_i^{(1)*} A_i^{(2)} + A_i^{(1)} A_i^{(2)*} = 4|A_i^{(1)}|^2 \quad (4.48)$$

и вдвое превосходит вероятность $|A_i^{(1)}|^2 + |A_i^{(2)}|^2 = 2|A_i^{(1)}|^2$, получающуюся при отсутствии интерференции. Здесь необходимо проанализировать влияние интерференции на электропроводность системы. Напомним, что вклад электрона в электропроводность металла обратно пропорционален вероятности его рассеяния в некоторой точке B , в результате чего импульс электрона меняется на величину порядка самого импульса. Обратим внимание на то, что рассматриваемая нами металлическая система при условии, когда в проводимости существен вклад квантовых поправок, качественно отличается от системы, проводимость которой описывается на языке почти свободных электронов. Во втором случае электроны находятся в совершенном кристалле и описываются блоховскими волновыми функциями, которые являются плоскими волнами и соответствуют идеально периодической (с периодом кристалла) плотности вероятности нахождения электрона в разных точках кристалла. В этом случае вероятность рассеяния электрона, например, на примесях или фононах полностью определяется концентрацией рассеивателей и их эффективным сечением.

В режиме, когда существенны квантовые поправки, ситуация качественно другая. В этом случае электрон подобен квазиклассической броуновской частице и мы рассматриваем его движение от точки A , в которой находится рассеивающая примесь, в точку B , где находится другая рассеивающая примесь, посредством многочисленных малых «шагов» с длиной порядка длины свободного пробега l_i при рассеянии на примесях. В этом случае вероятность w рассеяния электрона в точке B пропорциональна вероятности того, что электрон окажется в этой точке, т. е. квадрату модуля его волновой функции. Коэффициент пропорциональности, разумеется, зависит от эффективного сечения рассеивателя, но он одинаков для всех различных точек B и поэтому существенна только плотность вероятности нахождения в ней самого электрона. Таким образом, согласно формуле Друде—Лоренца $\sigma = \frac{e^2 n \tau}{m^*}$,

которая качественно применима в рассматриваемом случае, $\rho = 1/\sigma \sim 1/\tau = w$ и, следовательно, вклад интерференционных слагаемых в формуле (4.46), который увеличивает вероятность обнаружить электрон в точке B , приводит к увеличению сопротивления, а не проводимости системы. Таким образом, возникновение коге-

рентных траекторий $A_i^{(1)}$ и $A_i^{(2)}$ в результате самопересечения приводит к увеличению сопротивления и дает отрицательную поправку — $\Delta\sigma$ к проводимости металла. Напротив, подавление интерференционных эффектов (как это, например, происходит в магнитном поле) приводит к уменьшению сопротивления (в данном примере — к отрицательному магнетосопротивлению). Оценим порядок величины интерференционной поправки проводимости. Относительная величина поправки $\Delta\sigma/\sigma$ равна доле траекторий с самопересечением среди всех возможных траекторий электрона между точками A и B , т. е., иными словами, равна вероятности образования траекторий с самопересечением. Если бы электрон был точечной частицей, то такая вероятность была бы очень малой (близкой к нулю) на самом деле траектория электрона в квазиклассическом приближении представляет собой трубку с диаметром $\sim \lambda_B = h/p_F$. При этом вероятность самопересечения траекторий оказывается вполне конечной величиной, которую можно оценить следующим образом.

Пусть электрон движется в течение времени t , значительно большего времени свободного пробега τ_i , упругим образом рассеиваясь на примесях. Движение в течение времени t носит характер диффузии, причем электрон за это время может попасть в любую точку, находящуюся от исходной на расстоянии диффузионной длины $L_D = \sqrt{Dt}$, где D — коэффициент диффузии, равный в рассматриваемом случае $\frac{1}{3}v_F l_i$ (он соответствует коэф-

фициенту диффузии броуновских частиц, движущихся свободно со скоростью v_F на длине пути l_i). Это означает, что за время t для электрона доступны все точки объема $\sim L_D^3$. Для того чтобы в промежуток времени от t до $t+dt$ произошло «самопересечение» траектории электрона ($dt < \tau_i$), необходимо, чтобы объем трубки $\sim \lambda_B^2 v_F dt$, в которой находится электрон в течение времени dt , оказался внутри объема $L_D^3 \sim (Dt)^{3/2}$. Иными словами, для самопересечения нужно двойное событие: электрон дважды должен попасть в объем $\sim (Dt)^{3/2}$. Вероятность такого события $d\omega = \omega(t)dt$, очевидно, равна отношению объемов $\sim \lambda_B^2 v_F dt$ и $\sim (Dt)^{3/2}$.

Поскольку нас интересует полная вероятность, то нужно проинтегрировать $d\omega$ по времени. В качестве нижнего предела интеграла надо взять время $\sim \tau_i$, ибо представление о диффузионном движении применимо только при $t > \tau_i$. Верхним пределом интеграла является период времени τ_0 , в течение которого состояния остаются когерентными и могут интерферировать друг с другом. Этот период иначе называется временем релаксации фазы (временем сбоя фазы) волновой функции в результате неупругих процессов рассеяния.

Таким образом для трехмерной системы относительная квантовая поправка к проводимости составляет

$$\frac{\Delta\sigma^{\text{III}}}{\sigma^{\text{III}}} \sim - \int_{\tau_i}^{\tau_\Phi} \frac{\lambda_B^2 v_F}{(Dt)^{3/2}} dt = \frac{\lambda_B^2 v_F}{D^{3/2}} \left(\frac{1}{\tau_i^{1/2}} - \frac{1}{\tau_\Phi^{1/2}} \right) \sim$$

$$\sim -\lambda_B^2/l_i^2 + \lambda_B^2/\sqrt{3} l_i L_\Phi, \quad (4.49)$$

где введено обозначение $L_\Phi = \sqrt{D\tau_\Phi}$, определяющее расстояние, на котором происходит сбой фазы волновой функции в результате неупругого рассеяния. Как уже указывалось выше, интерференционная поправка к проводимости $\Delta\sigma^{\text{III}}$ отрицательна. Учитывая, что проводимость системы

$$\sigma^{\text{III}} \simeq \frac{e^2 n \tau_i}{m^*} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} (k_F l_i) \cdot k_F = \frac{4}{3} \frac{e^2}{\hbar} \frac{l_i}{\lambda_B^2},$$

можно показать, что абсолютная величина $\Delta\sigma^{\text{III}}$ поправки составляет

$$\Delta\sigma^{\text{III}} \sim - \frac{e^2}{\hbar l_i} + \frac{e^2}{\hbar L_\Phi}. \quad (4.50)$$

В формуле (4.50) доминирует первое слагаемое, поскольку $L_\Phi \gg l_i$, однако последний член представляет интерес, так как он сильно зависит от температуры через величину $L_\Phi = \sqrt{D\tau_\Phi}$. Аналогичное вычисление поправки к проводимости для двумерной системы дает

$$\Delta\sigma^{\text{III}} \sim - \frac{e^2}{\hbar} \ln \left(\frac{L_\Phi}{l_i} \right). \quad (4.51)$$

Квантовые поправки приводят к тому, что проводимость металла при температурах $T < T_1$ начинает зависеть от температуры по закону

$$\Delta\sigma^{\text{III}} \sim T^{1/2}, \quad \Delta\sigma^{\text{II}} \sim \ln T,$$

который является следствием формул (4.50) и (4.51) и соотношения $\tau_\Phi \sim \hbar/kT$.

Вычисленные выше квантовые поправки получены в приближении невзаимодействующих электронов. Наряду с ними имеют место квантовые поправки, связанные с электрон-электронным взаимодействием, а также поправки, связанные с рассеянием электронов на сверхпроводящих флуктуациях. Все квантовые поправки имеют один и тот же порядок величины и одинаковый характер зависимости от температуры или частоты электромагнитного поля.

§ 6. ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ

Выше указывалось, что квантовые поправки возникают в результате интерференции когерентных волновых функций электронов вдоль траекторий с самопересечением. Эта когерентность может быть разрушена магнитным полем. Действительно, когерентность возникает в результате того, что при обходе петли по или против часовой стрелки не меняется значение фазового интеграла (4.47), который инвариантен относительно замены $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ и $d\mathbf{l} \rightarrow -d\mathbf{l}$. В магнитном же поле импульс электрона $\mathbf{p}$ необходимо заменить на обобщенный импульс, равный $\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$, где $\mathbf{A}$ — векторный потенциал. При обходе петли в обратном направлении импульс $\mathbf{p}$ меняет знак, тогда как векторный потенциал $\mathbf{A}$ сохраняет свой знак. В результате у интерферирующих волновых функций для петлевой траектории появляется разность фаз $\Delta\varphi_H$, равная удвоенному набегу фазы $\Delta\varphi$ за счет члена с векторным потенциалом $\frac{e}{c} \mathbf{A}$ в обобщенном импульсе при обходе петлевой траектории в том или ином направлении:

$$\Delta\varphi_H = \frac{2e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \frac{2e}{\hbar c} \int_S \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S} = 2 \cdot 2\pi \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}}{\Phi_0} = 2 \cdot 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}, \quad (4.52)$$

где интегрирование ведется по замкнутому контуру петли (рис. 145) (здесь S — площадь проекции петли на плоскость, перпендикулярную магнитному полю $\mathbf{H}$, Φ — поток магнитного поля через площадь S , $\Phi_0 = \frac{ch}{e} = 4,13 \cdot 10^{-7}$ Гс·см² — квант магнитного потока). Появление разности фаз нарушает когерентность волновых функций при обходе петли по или против часовой стрелки и, следовательно, разрушает их интерференцию, приводящую к учетверению амплитуды (см. (4.48)). Это эквивалентно уменьшению сопротивления системы, т. е. появлению отрицательного магнетосопротивления (ОМС). Для оценки величины ОМС введем зависящее от магнитного поля характерное время t_H , которое определим таким образом, чтобы изменение фазы вдоль контура, проходимого электроном за это время, составляло 2π . Для этой цели возьмем в качестве характерного размера петли в формуле (4.52) диффузионную длину L_H , соответствующую времени t_H . Поток магнитного поля через контур такого размера составляет $\Phi \sim H \cdot L_H^2 = H \cdot D \cdot t_H$, что дает для разности фаз величину

$$\Delta\varphi_H \sim 4\pi \cdot \frac{4D t_H}{\Phi_0}.$$

Приравнивая последнюю величину 2π , для значения t_H получим

$$t_H \sim \frac{\Phi_0}{2H \cdot D} \sim \pi \frac{\lambda_H^2}{D}, \quad (4.53)$$

где $\lambda_H = \left(\frac{c\hbar}{eH} \right)^{1/2}$ — магнитная длина, определяющая размер волновой функции электрона в магнитном поле. Таким образом, за время порядка t_H происходит накопление разности фаз $\sim \pi$ между двумя волновыми функциями, которые были когерентны при $H=0$, и, следовательно, за это время подавляется интерференция волновых функций вдоль соответствующих траекторий петлевого типа (траекторий с самопересечением). Минимальное значение магнитного поля, при котором возникает подавление интерференции и, следовательно, отрицательное магнетосопротивление, можно определить, если в формуле (4.53) вместо t_H подставить время сбоя фазы τ_ϕ волновой функции в результате неупругого рассеяния электронов. Это поле, обозначаемое H_ϕ , составляет

$$H_\phi \sim \Phi_0 / 2D\tau_\phi. \quad (4.54)$$

Нетрудно видеть, что поле H_ϕ является классически слабым магнитным полем, для которого характерно выполнение неравенства $\omega_c \tau_i \ll 1$, где ω_c — циклотронная частота. Действительно, оценим произведение $\omega_c \tau_i$ при $H=H_\phi$:

$$\omega_c \tau_i = \frac{eH_\phi \tau_i}{mc} \sim \frac{ech\tau_i}{2emc} \cdot \frac{1}{\frac{1}{3} v_F l_i \tau_\phi} \sim \frac{\hbar/\tau_\phi}{mc v_F^2} \sim \frac{\hbar/\tau_\phi}{\epsilon_F}. \quad (4.55)$$

Последняя величина в металле при низких температурах много меньше единицы. Таким образом, ОМС, связанное с подавлением квантовой поправки в магнитном поле, наблюдается в классически слабых полях, при которых полностью отсутствует ландау-ское квантование энергии электронов.

Перейдем теперь к вычислению квантовой поправки к проводимости в магнитном поле. Поскольку интерферирующие амплитуды $A_i^{(1)}$ и $A_i^{(2)}$ в магнитном поле приобретают дополнительные фазовые множители $\exp\left(i2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)$ и $\exp\left(-i2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)$, то относительная поправка к проводимости должна быть дополнительно пропорциональна

$$\cos\left(4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) = \cos(4\pi) \frac{HS}{\Phi_0}.$$

Формула для вычисления относительной поправки к проводимости (подобная (4.49)) в этом случае должна быть записана в виде

$$\frac{\Delta\sigma^{\text{III}}}{\sigma^{\text{III}}} \sim - \int_{\tau_i}^{\tau_\phi} \frac{\lambda_B^2 v_F dt}{(Dt)^{3/2}} \int W(S, t) \cos\left(\frac{4\pi HS}{\Phi_0}\right) dS, \quad (4.56)$$

где $W(S, t)$ — вероятность того, что петля длиной $v_F t$ имеет площадь проекции на плоскость, перпендикулярную магнитному полю, равную S .

Вычисления показывают, что в трехмерном случае поправка к проводимости составляет

$$\Delta\sigma^{\text{III}}(H) \sim \frac{e^2}{h\lambda_H} \begin{cases} (D\tau_q/\lambda_H^2)^{3/2} & \text{при } t_H \gg \tau_q, \\ 1 & \text{при } t_H \ll \tau_q. \end{cases} \quad (4.57)$$

В двумерном случае соответствующая поправка составляет

$$\Delta\sigma^{\text{II}}(H) \sim \frac{e^2}{h} \begin{cases} (D\tau_q/\lambda_H^2) & \text{при } t_H \gg \tau_q, \\ \ln(D\tau_q/\lambda_H^2) & \text{при } t_H \ll \tau_q. \end{cases} \quad (4.58)$$

§ 7. ОСЦИЛЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В РЕЖИМЕ КВАНТОВЫХ ПОПРАВОК К ПРОВОДИМОСТИ

С подавлением интерференции электронных волн в магнитном поле связаны специфические эффекты, которые проявляются в виде осцилляций магнетосопротивления у полых цилиндров или колечек достаточно малого размера. Эти осцилляции периодичны в магнитном поле и имеют период, равный Φ_0/S или $\Phi_0/2S$, где S — площадь сечения цилиндра или колечка.

Подчеркнем, что наблюдающиеся в режиме квантовых поправок осцилляции проводимости металла не связаны с ландауским квантованием энергии электронов и вытекающими из него осцилляциями плотности электронных состояний на уровне Ферми. Осцилляционные эффекты в режиме квантовых поправок происходят в классически слабых магнитных полях, при которых не выполняются условия для ландауского квантования $\omega_c \tau_i > 1$, $\hbar \omega_c > kT$. Осцилляции магнетосопротивления в режиме квантовых поправок по своей природе связаны с эффектом Ларонова—Бома, предсказанным теоретически в 1959 г. (Aharonov Y., Bohm D. Phys. Rev. 1959. V. 115. P. 485), в котором проявляется влияние векторного потенциала A на интерференцию связанных с электроном волн де Бройля. Чтобы пояснить возникновение осцилляций при $\omega_c \tau_i < 1$, рассмотрим для примера движение электронов в тонкостенном цилиндре, помещенном в магнитное поле, параллельное его оси. Пусть радиус цилиндра равен R , а толщина стенки — b , и предположим, что выполнены условия

$$l_i \ll b \ll 2\pi R < L_\varphi. \quad (4.59)$$

В силу того что $l_i \ll 2\pi R$, ландауского квантования энергии электрона при движении по орбитам с радиусом $\gg R$ (т. е. по замкнутым орбитам внутри стенки цилиндра (см. рис. 146)) не происходит. Будем следить за поведением продольного магнетосопротивления цилиндра (измерительный ток течет параллельно оси цилиндра). В силу того что $2\pi R < L_\varphi$, для электронных волн, распро-

страняющихся из некоторой точки A по или против часовой стрелки, не происходит сбоя фазы после полного обхода замкнутого контура с радиусом $\sim R$ и возвращения в ту же точку. Две волны, соответствующие двум противоположным направлениям обхода контура в магнитном поле, приобретают разность фаз $\Delta\varphi = 4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$, где Φ — поток магнитного поля через полость цилиндра. Таким образом, плотность вероятности возвращения электрона в точку A , пропорциональная $\cos\left(4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)$, а следовательно, и вероятность его рассеяния будут осциллировать с пе-

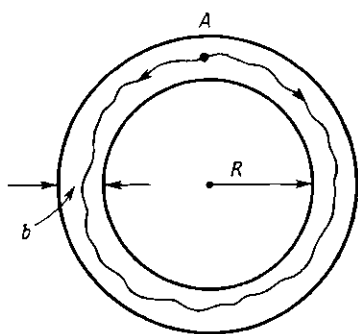


Рис. 146

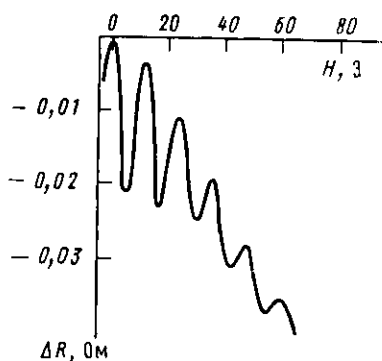


Рис. 147

риодом $\Phi_0/2$. Вследствие этого с периодом $\Phi_0/2$ будет осциллировать и сопротивление цилиндра в магнитном поле, поскольку в каждой точке топокстенного цилиндра выполняются одинаковые для всех электронов условия осцилляций вероятности рассеяния. Обратим внимание на то, что в топокстенном цилиндре период осцилляций определяется величиной $\Phi_0/2$ и совпадает с квантом магнитного потока для куперовских пар в сверхпроводнике:

$$\Phi_0/2 = \frac{ch}{2e} = 2,07 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2.$$

Экспериментально явление осцилляций магнетосопротивления полого цилиндра с периодом $\Phi_0/2$ было обнаружено Ю. В. и Д. Ю. Шарвинскими в 1981 г. (Шарвин Д. Ю., Шарвин Ю. В. Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 34. С. 285). Для измерения магнетосопротивления использовался металлический цилиндр в виде тонкой пленки, напыленной на кварцевую нить микроного размера. Полученная в работе кривая осцилляций продольного магнетосопротивления показана на рис. 147.

§ 8. МЕЗОСКОПИКА

В физике твердого тела общепринято, что в системах макроскопического размера, состоящих из большого числа N частиц, тепловые флуктуации кинетических и термодинамических характеристик убывают пропорционально $N^{-1/2}$ и при переходе к термодинамическому пределу $N \rightarrow \infty$ становятся определенными величинами. Такое поведение является следствием того, что флуктуации параметров подчиняются гауссову распределению случайных величин. Общепринятое предположение о гауссовом распределении параметров твердого тела оказывается, однако, неверным в том случае, когда рассматриваются макроскопические системы с размером L , меньшим длины L_c , на которой теряется когерентность электронных волн. При этом термодинамические и кинетические параметры становятся так называемыми «песамоусредняющимися» величинами, т. е. такими, для которых средняя относительная флуктуация не уменьшается, а, наоборот, растет при увеличении размеров системы L до тех пор, пока не нарушится неравенство $L < L_c$. При $L > L_c$ самоусредняемость восстанавливается. (Песамоусредняемость параметров x_i означает, что они описываются более широкой, чем гауссова, функцией распределения, при которой $\overline{x_i^2} \neq (\overline{x_i})^2$, $\overline{x_i^{-1}} \neq (\overline{x_i})^{-1}$ и т. д. (черта сверху — знак усреднения). Причиной песамоусредняемости является отличие усреднения по расположению примесей от термодинамического усреднения по ансамблям.)

При отсутствии самоусреднения свойства двух макроскопических образцов с $L < L_c$, состоящих из большого числа атомов или молекул и изготовленных в одинаковых условиях, в действительности могут существенно отличаться. Отсутствие самоусреднения теоретически было показано Абрикосовым и Рыжким для одномерных грязных металлов (цепочка атомов с примесями), имеющих длину $L < L_c$ (Abrikosov A. A., Ryzkin I. A. *Advances in Phys.* 1978. V. 27. P. 147). Отсюда следует, что свойства систем с $L < L_c$ и $L > L_c$ отличаются на качественном уровне и экстраполяция свойств через значение $L = L_c$ некорректна.

Обратим внимание на самое важное обстоятельство, что при $L < L_c$ возникает отличие в свойствах двух образцов, содержащих большое число атомов, от которых можно было бы ожидать вполне макроскопического поведения. Область физики твердого тела, изучающая макроскопические объекты с размерами $L < L_c$, получила название «мезоскопика». Оценки показывают, что мезоскопические эффекты (т. е. отсутствие самоусредняемости параметров) при $T \lesssim 0,1$ К могут наблюдаться в образцах микронных размеров, которые характерны, например, для элементов больших интегральных микросхем в твердотельной электронике.

Необычное поведение макроскопического образца, имеющего мезоскопические размеры, является следствием квантовой интерференции электронных волн, которая характерна для конкретной конфигурации упругих рассеивателей в образце. Таким образом,

мезоскопические эффекты имеют ту же природу, что и интерференционные квантовые поправки. Мезоскопические эффекты исчезают при усреднении по конфигурации примесей.

Типичным примером мезоскопического поведения являются магнитополевые осцилляции сопротивления полого цилиндра, высота которого h меньше, чем длина L_φ , на которой теряется когерентность электронных волн. Выше были рассмотрены магнитополевые осцилляции сопротивления полого цилиндра, связанные с интерференцией электронных волн, прошедших по окружности цилиндра по и против часовой стрелки и возвращающихся в одну и ту же точку A , и было показано, что они происходят с периодом $\Delta\Phi = \Phi_0/2$. Покажем, что осцилляции с таким периодом могут наблюдаться только в цилиндре, высота которого h значительно превосходит расстояние L_φ , на котором теряется когерентность, тогда как в цилиндрах с $h < L_\varphi$ (по существу, в колечках) наряду с осцилляциями с периодом $\Delta\Phi = \Phi_0/2$ наблюдаются также осцилляции с вдвое большим периодом $\Delta\Phi = \Phi_0$. Для этого рассмотрим в стенке цилиндра электронные траектории другого типа. Пусть одна из таких траекторий выходит из какой-то точки A и приходит в какую-то другую точку B (рис. 148, а). Вторая

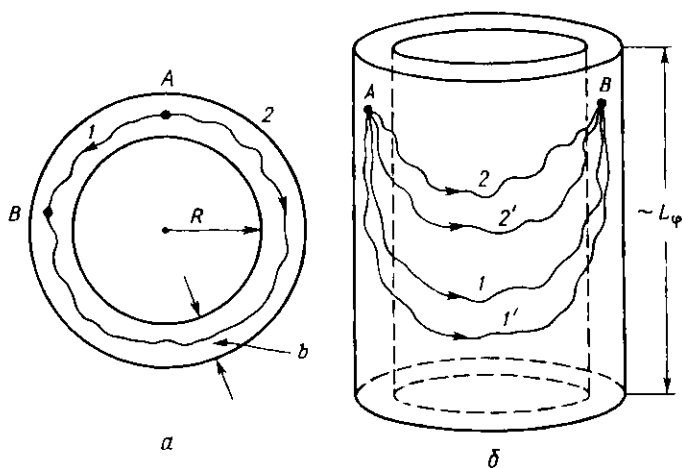


Рис. 148

траектория выходит из той же точки A и приходит в точку B , но при этом огибает полость с другой стороны. Разность фаз $\Delta\varphi$ между этими траекториями равна

$$\Delta\varphi = \frac{1}{h} \oint \mathbf{p} d\mathbf{l} - \frac{e}{ch} \oint \mathbf{A} d\mathbf{l}, \quad (4.60)$$

где интеграл берется по замкнутому контуру, образованному двумя траекториями. После преобразования $\oint \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S}$ второе

слагаемое превращается в $2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}$, и при изменении потока на Φ_0 это слагаемое меняется на 2π . Рассмотрим теперь первое слагаемое в (4.60). Это слагаемое для разных траекторий 1, 1', 2, 2' и т. д., расположенных в цилиндрической полоске с высотой $h \sim L_\varphi$ (рис. 148, б), или, что то же самое, для разных конфигураций рассенвателей, дает большой набор разностей фаз. Усреднение по разным траекториям обращает в нуль соответствующий вклад в интерференцию электронных волн. Таким образом, в цилиндре с высотой $h > L_\varphi$ осцилляции с периодом $\Delta\Phi = \Phi_0$ не возникают в результате усреднения по конфигурации примесей. Если, однако, вместо длинного цилиндра с $h > L_\varphi$ взять тонкое колечко с $h \ll L_\varphi$, то указанное выше усреднение за счет первого слагаемого в (4.60) не происходит. Вклад же в интерференцию от траекторий, проходящих по окружности цилиндра по и против часовой стрелки, для колечка остается. Вследствие этого в колечке должны наблюдаться осцилляции сопротивления как с периодом Φ_0 , так и с периодом $\Phi_0/2$. Осцилляции с указанными периодами наблюдались экспериментально в 1984 г. на микронных металлических колечках, выполненных в виде пленки (Eds. B. Kramer, G. Bergmann, Y. Buynserade. Localisation, Interaction and Transport Phenomena. Springer Series in Solid State Physics. 1984. V. 61). Таким образом, в отличие от длинного цилиндра с $h > L_\varphi$ тонкое колечко с $h < L_\varphi$ является мезоскопической системой, в которой нет усреднения по конфигурациям примесей. Осцилляции с периодом $\Delta\Phi = \Phi_0$ в колечке, по существу, соответствуют аномально большим (из-за мезоскопичности образца) периодическим флуктуациям, которые исчезают при нарушении условия мезоскопичности $h < L_\varphi$ в результате усреднения по различным конфигурациям примесей. В связи с этим отметим, что в колечке, помимо осцилляционного эффекта с периодом $\Delta\Phi = \Phi_0$ (имеющего, как мы показали, флуктуационную природу), в вероятности рассеяния имеются и другие интерференционные члены, которые сильно зависят от магнитного поля и приводят к беспорядочным (непериодическим) флуктуациям на кривой магнетосопротивления. Отметим, однако, что эти флуктуации не являются шумом, так как они не меняются во времени, а отражают конкретную картину случайного распределения примесей в колечке и идеально воспроизводятся при повторении записи кривой магнетосопротивления. Их иногда называют «травой» на регулярной (монотонной или периодически осциллирующей) кривой магнетосопротивления (рис. 149). Другим характерным примером мезоскопического эффекта являются флуктуации тока (или вольт-амперной характеристики) тонкой металлической проволоочки длиной L и диаметром b , которые удовлетворяют условиям

$$l_i \ll b \ll L < L_\varphi. \quad (4.61)$$

Рассмотрим интерференцию между электронами в такой проволочке. Она, очевидно, возможна только между электронами

с близкими энергиями. Допустимый интервал энергий $\delta\epsilon$ интерферирующих электронов при этом определяется из условия, чтобы разность фаз $\Delta\varphi$ на границах этого интервала была порядка π :

$$\Delta\varphi = \frac{1}{h} [p_F(\epsilon + \delta\epsilon) - p_F(\epsilon)] S \sim \frac{1}{h} S \frac{dp_F}{d\epsilon} \delta\epsilon \sim \frac{S\delta\epsilon}{\hbar v_F} \sim \pi, \quad (4.62)$$

где S — полная длина пути, проходимого частицей. Если длина диффузии электронов равна размеру проволоочки L , то время

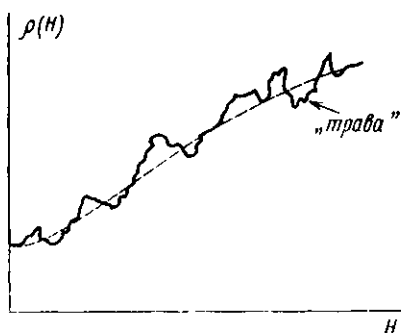


Рис. 149

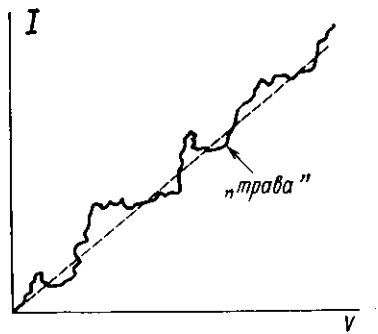


Рис. 150

диффузии $\sim L^2/D$ (D — коэффициент диффузии: $D = \frac{1}{3} v_F l_l$) и $S \sim v_F \frac{L^2}{D}$. Следовательно,

$$\delta\epsilon \sim \frac{\pi \hbar v_F}{S} \sim \pi \frac{\hbar D}{L^2}. \quad (4.63)$$

Таким образом, электроны интерферируют только в пределах интервала энергий $\delta\epsilon \sim \pi \frac{\hbar D}{L^2}$ или в пределах изменения напряжения δV на вольт-амперной характеристике:

$$\delta V \sim \pi \hbar D / e L^2.$$

Амплитуду флуктуаций тока можно найти следующим образом.

Если вольт-амперная характеристика измеряется при изменении напряжения от 0 до V и $V \gg \delta V$, то область напряжений $0 \div V$ распадается на $V/\delta V$ интерференционно независимых интервалов: электроны, соответствующие разным интервалам, не интерферируют между собой. Рассмотрим, какова интерференционная до-

бавка к току, соответствующая одному из этих интервалов. По порядку величины она составляет:

$$\Delta I = \Delta \left(\frac{\delta V}{R} \right) = \Delta \left(\frac{\delta V}{L i \sigma b^2} \right) = \frac{\delta V}{L} b^2 \Delta \sigma,$$

где $\Delta \sigma$ — интерференционная поправка к проводимости. Отсюда следует, что

$$\Delta I \sim \frac{e^2}{h} \delta V. \quad (4.64)$$

Следует обратить внимание, однако, что различные интервалы, в которых происходит интерференция, не скоррелированы между собой и соответствующие вклады в ток могут иметь разный знак. Суммарный вклад можно определить тем же способом, которым находится расстояние X , проходимое частицей при диффузионном движении:

$$X = \sqrt{Dt} = \sqrt{\frac{1}{3} l_i v_F t} \cong \sqrt{l_i P},$$

где l_i — длина свободного пробега, проходимая в одном акте «свободного» движения (в нашем случае она соответствует δV), а $P = v_F t$ — полная длина ломаного пути диффундирующей частицы (в нашем случае она соответствует полному интервалу напряжений V).

Таким образом, суммарный эффект (амплитуда) флуктуаций тока равен

$$I_{fluct} \sim \frac{e^2}{h} \sqrt{V \delta V}. \quad (4.65)$$

Эти флуктуации налагаются в виде нерегулярной волнистой линии («травы») на регулярную кривую, отвечающую закону Ома $I = V/R_0$ (рис. 150).

Отметим, что отношение $I_{fluct}/\delta V$ по порядку величины равно

$$\frac{I_{fluct}}{\delta V} \sim \frac{e^2}{h} \sqrt{\frac{V}{\delta V}}, \quad (4.66)$$

т. е. растет с увеличением напряжения V . В том случае, когда $I_{fluct}/\delta V > R_0^{-1}$, т. е. при

$$V > \left(\frac{h}{e^2 R_0} \right) \delta V, \quad (4.67)$$

на вольт-амперной характеристике появляются участки с отрицательным наклоном (N -образные участки, отвечающие отрицательной дифференциальной проводимости). Такая ситуация может привести к образованию движущихся доменов с высоким значением электрического поля внутри домена, аналогичного тому, как это происходит в известном эффекте Ганна.

Мезоскопические флуктуации вольт-амперной характеристики наблюдаются не только в проволочках, но и в микрсконтактах в виде, например, малого отверстия в стенке, соединяющего две металлические области. Интересно отметить полностью некоррелированный характер мезоскопических флуктуаций двух различных кинетических коэффициентов малых металлических образцов, если один из них пропорционален производной другого по какому-нибудь параметру. Характерным примером таких коэффициентов являются проводимость σ и термоЭДС α . Проводимость пропорциональна концентрации носителей тока n , тогда как термоЭДС пропорциональна величине $\frac{dn}{de}$, т. е. $\alpha \sim \frac{d\sigma}{de}$. При дифференцировании флуктуирующей добавки к проводимости возникает новая флуктуирующая зависимость, коррелятор которой с флуктуациями первообразной равен нулю: $\langle \delta\alpha \cdot \delta\sigma \rangle = 0$.

Отсутствие корреляции флуктуаций α и σ хорошо наблюдается, если сопоставлять, например, флуктуирующие зависимости этих величин от магнитного поля.

В настоящее время обнаружено довольно много мезоскопических эффектов и приведенные выше примеры не единственны. Все мезоскопические эффекты исчезают при повышении температуры и размеров образца. Это связано не только с уменьшением L_ϕ , но и с изменением распределения электронов по энергиям. Последнее нуждается в некотором пояснении.

Предположим, что при увеличении температуры kT начинает превосходить интерференционный интервал энергий $\delta\epsilon$, определенный соотношениями (4.6) и (4.63). В этом случае весь интервал температур T аналогично интервалу V при измерении вольт-амперной характеристики разбивается на интерференционно независимые интервалы δT , в которых интерференционные добавки могут иметь разный знак. Аналогично предыдущему суммарный эффект пропорционален $\sqrt{kT \cdot \delta\epsilon}$. Среднее значение этого вклада равно $\sqrt{kT \cdot \delta\epsilon/kT} = \sqrt{\delta\epsilon/kT}$ и убывает с ростом температуры, как $T^{-1/2}$. Такая зависимость амплитуды мезоскопических эффектов от температуры согласуется с экспериментальными данными. Таким образом, для наблюдения ярко выраженных мезоскопических эффектов необходимо выполнить условие $\delta\epsilon > kT$, которое соответствует неравенству

$$L \leq L_T \sim \sqrt{\frac{\hbar D}{kT}}. \quad (4.68)$$

Итак, для наблюдения мезоскопических эффектов необходимо выполнить не только условие $L < L_\phi$, но и $L < L_T$. Отметим при этом, что температурное размытие распределения Ферми по своей сути эквивалентно усреднению по различным конфигурациям рассеивателей и поэтому никак не сказывается при вычислении квантовых поправок к проводимости.

Мезоскопические эффекты накладывают естественный предел на уменьшение размеров элементов интегральных схем в микроэлектронике и, по существу, ограничивают беспредельную миниатюризацию компьютерной техники. Микроскопические флуктуации делают невозможным производство одинаковых стандартных элементов (резисторов, p — n -переходов, ячеек памяти и т. д.) слишком малых размеров. Более того, из-за мезоскопических эффектов нельзя даже рассчитывать на то, что среди элементов малых размеров возможно путем отбора найти такие, которые были бы близки друг другу по ряду параметров и обладали нужными свойствами (например, гладкой вольт-амперной характеристикой без участков отрицательной проводимости, гладкой зависимостью сопротивления от магнитного поля и т. д.). Физика твердого тела впервые столкнулась с эффектами фиксированных и воспроизводимых флуктуаций, а также с тем, что при достижении определенного малого (но вполне еще макроскопического) размера металлические или полупроводниковые системы теряют некоторые свойства, присущие образцам большого размера. Понимание этих проблем и своевременный их учет имеют важное значение при создании современных микроэлектронных приборов.

Глава 5

ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

§ 1. ЭЛЕКТРОННЫЕ СИСТЕМЫ С КВАДРАТИЧНЫМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Распределение электронных состояний по энергии является одной из наиболее важных характеристик электронного энергетического спектра. Для того чтобы описать это распределение, введем понятие плотности состояний. Пусть $N(\epsilon)$ обозначает число состояний с энергией, меньшей или равной ϵ . Дифференциал $dN(\epsilon)$ дает число состояний в интервале энергий от ϵ до $\epsilon + d\epsilon$.

Плотностью состояний называется функция $\nu(\epsilon)$, равная отношению $dN(\epsilon)$ к ширине интервала $d\epsilon$:

$$\nu(\epsilon) = dN(\epsilon)/d\epsilon.$$

Эта функция тесным образом связана с законом дисперсии электронов $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$. Выражение для плотности состояний у свободных электронов было получено в § 1 гл. 1. На основе формулы для концентрации свободных электронов (1.9) было показано, что функция $\nu(\epsilon)$ пропорциональна $\sqrt{\epsilon}$ и не имеет особенностей ни при каких значениях энергии (см. (1.10) и рис. 52).

Нетрудно получить аналогичные выражения для плотности состояний квазичастиц в решетке, которые описываются квадратичным законом дисперсии. Рассмотрим системы квазичастиц различной размерности: трехмерные, двумерные и одномерные. Раз-

мерность системы будем обозначать с помощью индексов III, II, I (например, $N^{\text{III}}(\epsilon)$, $v^{\text{II}}(\epsilon)$ и т. д.).

В трехмерной системе квазичастиц объем фазового пространства, приходящийся на одно состояние, равен $(2\pi\hbar)^3/V$. Поскольку в одном состоянии могут находиться два электрона с противоположно направленными спинами, объем, приходящийся на одну квазичастицу, составляет $(2\pi\hbar)^3/2V$.

Рассмотрим вначале простейший изотропный закон дисперсии квазичастиц $\epsilon = p^2/2m^*$, который характеризуется одной компонентой тензора эффективных масс. Поверхности постоянной энергии в этом случае являются концентрическими сферами.

Число электронных состояний dN_p^{III} , находящихся в сферическом слое толщиной dp , расположенном между значениями импульсов p и $p+dp$, равняется объему слоя, деленному на $(2\pi\hbar)^3/2V$:

$$dN_p^{\text{III}} = 8\pi V p^2 dp / (2\pi\hbar)^3.$$

Переходя с помощью закона дисперсии $\epsilon = p^2/2m^*$ от переменной p к переменной ϵ , получим

$$dN^{\text{III}}(\epsilon) = \frac{8\sqrt{2}\pi V}{(2\pi\hbar)^3} (m^*)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon, \quad (5.1)$$

откуда

$$v^{\text{III}}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}V}{\pi^2\hbar^3} (m^*)^{3/2} \epsilon^{1/2}. \quad (5.2)$$

Таким образом, выражение для плотности состояний трехмерной системы квазичастиц с квадратичным изотропным законом дисперсии совпадает с аналогичным выражением для свободных электронов (1.10), если массу свободного электрона m_0 заменить на эффективную массу m^* . График функции $v^{\text{III}}(\epsilon)$ (5.2) совпадает с графиком на рис. 52.

Выражение (5.2) нетрудно обобщить на случай квадратичного анизотропного закона дисперсии (3.32), которому соответствуют эллипсоидальные изоэнергетические поверхности. Полуоси эллипсоида постоянной энергии ϵ равны $\sqrt{2m_x\epsilon}$; $\sqrt{2m_y\epsilon}$; $\sqrt{2m_z\epsilon}$, а его объем $\Delta(\epsilon)$ составляет $\frac{4}{3}\pi(2\epsilon)^{3/2}(m_x m_y m_z)^{1/2}$. Число электронных состояний внутри такого эллипсоида:

$$N^{\text{III}}(\epsilon) = \frac{\Delta(\epsilon)}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2V = \frac{16\sqrt{2}\pi V}{3(2\pi\hbar)^3} (m_x m_y m_z)^{1/2} \epsilon^{3/2}. \quad (5.3)$$

Дифференцируя по ϵ , находим плотность электронных состояний $v^{\text{III}}(\epsilon)$ для эллипсоидальных изоэнергетических поверхностей:

$$v^{\text{III}}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2}V}{\pi^2\hbar^3} (m_x m_y m_z)^{1/2} \epsilon^{1/2}. \quad (5.4)$$

Видно, что при переходе от сферической поверхности Ферми к эллипсоидальной характер зависимости v^{III} от ϵ ($v^{III} \sim \epsilon^{1/2}$) не меняется.

Величина размерности массы, равная кубическому корню из произведения диагональных компонент тензора эффективных масс $(m_x m_y m_z)^{1/3}$, которая определяет величину $v^{III}(\epsilon)$, получила название эффективной массы плотности состояний и обозначается m_d^* :

$$m_d^* = (m_x m_y m_z)^{1/3}. \quad (5.5)$$

В изотропном случае m_d^* совпадает с единственным параметром размерности массы — с эффективной массой m^* .

Как было показано в § 1 гл. 3, эллипсоидальные поверхности постоянной энергии обычно расположены в окрестности минимумов или максимумов энергии в зоне Бриллюэна.

Вблизи минимума энергии поверхности являются электронными и ограничивают заполненную часть p -пространства. Минимум энергии определяет положение дна зоны $\mathcal{E}_c$. Поэтому если формула (5.4) используется для описания плотности электронных состояний в зоне, то величина ϵ в ней представляет собой энергию $\mathcal{E}$ электрона, отсчитываемую от дна зоны: $\epsilon = \mathcal{E} - \mathcal{E}_c$.

Вблизи максимума энергии изоэнергетические поверхности являются дырочными и ограничивают не заполненную квазичастицами (пустую) часть p -пространства. Максимум энергии определяет положение $\mathcal{E}_v$ потолка энергетической зоны. Поэтому когда формула (5.4) используется для описания плотности дырочных состояний, то величина ϵ представляет собой энергию $\mathcal{E}$ дырки, которая отсчитывается от потолка $\mathcal{E}$ зоны вниз: $\epsilon = \mathcal{E}_v - \mathcal{E}$.

Аналитическое выражение для плотности состояний $v^{II}(\epsilon)$ двумерной системы можно получить тем же способом, который был использован при выводе формул (5.2) и (5.3).

Для двумерной кристаллической решетки на одно электронное состояние приходится площадь фазового пространства величиной $(2\pi\hbar)^2/S$, где S — площадь кристалла.

В случае изотропного закона дисперсии $\epsilon = p^2/2m^*$ изоэнергетические кривые являются концентрическими окружностями. При этом число электронных состояний в колечке шириной dp , заключенном между окружностями с радиусами p и $p+dp$, составляет

$$dN_p^{II} = \frac{4\pi S p dp}{(2\pi\hbar)^2}.$$

Переходя с помощью закона дисперсии от переменной p к переменной ϵ , получим

$$dN^{II}(\epsilon) = \frac{4\pi S}{(2\pi\hbar)^2} m^* d\epsilon. \quad (5.6)$$

Выражение для плотности состояний имеет вид

$$v^{II}(\epsilon) = \frac{S}{\pi\hbar^2} m^*. \quad (5.7)$$

Основной особенностью плотности состояний для двумерной системы является то, что она не зависит от энергии и определяется только величиной эффективной массы квазичастиц.

Нетрудно показать, что для квадратичного анизотропного закона дисперсии $\epsilon = \frac{p_x^2}{2m_x} + \frac{p_y^2}{2m_y}$ выражение для плотности состояний $\nu^{II}(\epsilon)$ должно быть записано в виде

$$\nu^{II} = \frac{S}{\pi \hbar^2} (m_x m_y)^{1/2}. \quad (5.8)$$

Величина $m_d^* = (m_x m_y)^{1/2}$ называется эффективной массой плотности состояний для двумерной системы.

Для одномерного «кристалла» длиной L число электронов dN_p^I в элементе dp фазового пространства равно

$$dN_p^I = \frac{2Ldp}{(2\pi\hbar)} = \frac{Ldp}{\pi\hbar}. \quad (5.9)$$

Используя закон дисперсии $\epsilon = p^2/2m^*$, для плотности состояний $\nu^I(\epsilon)$ получим

$$\nu^I(\epsilon) = \frac{(m^*)^{1/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar} \epsilon^{-1/2}. \quad (5.10)$$

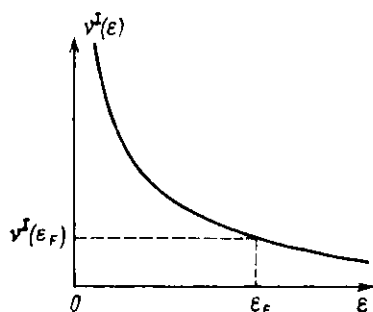


Рис. 151

В одномерном случае эффективная масса плотности состояний m_d^* просто совпадает с эффективной массой m^* квазичастицы. Функция $\nu^I(\epsilon)$ (рис. 151) возрастает при уменьшении ϵ и имеет бесконечную

интегрируемую особенность при $\epsilon=0$. Эта характерная черта плотности состояний одномерной системы играет принципиальную роль при распределении электронов по уровням энергии в квантующем магнитном поле.

§ 2. СИСТЕМЫ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЗАКОНОМ ДИСПЕРСИИ

Рассмотрим плотность состояний при произвольном законе дисперсии $\epsilon = \epsilon(p)$. Общее выражение для плотности состояний можно получить, исходя из того, что элементарный объем p -пространства $((2\pi\hbar)^3/2V$ — в случае трех измерений), приходящийся на одно электронное состояние, не зависит от закона дисперсии. Рассмотрим две изоэнергетические поверхности, соответствующие энергиям ϵ и $\epsilon + d\epsilon$. Для вычисления объема $\delta\Delta$, заключенного между ними слоя обозначим через dS элементарную площадку на поверхности $\epsilon = \text{const}$. Элементарный объем в слое между рассматриваемыми изоэнергетическими поверхностями равен $dS\delta p_{\perp}$,

где $\delta p_{\perp}$ — приращение импульса $\mathbf{p}$ по нормали к элементу dS при переходе от ϵ к $\epsilon + \delta\epsilon$. Учитывая, что нормальная к поверхности компонента скорости $v_n = \frac{\partial \epsilon}{\partial p_{\perp}}$, находим, что $dS \delta p_{\perp} = \frac{dS \delta \epsilon}{|v_n|}$. Объем слоя получается путем интегрирования $dS \delta p_{\perp}$ по поверхности S_{ϵ} , соответствующей постоянной энергии ϵ :

$$\delta \Delta_{\epsilon} = \oint_{S_{\epsilon}} dS \delta p_{\perp} = \oint_{S_{\epsilon}} \frac{dS \delta \epsilon}{|v_n|} = \delta \epsilon \oint_{S_{\epsilon}} \frac{dS}{|v_n|}. \quad (5.11)$$

Число электронных состояний $\delta N^{III}(\epsilon)$ в слое между изоэнергетическими поверхностями равно

$$dN^{III}(\epsilon) = \frac{2\delta \Delta_{\epsilon} \cdot V}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \left(\oint_{S_{\epsilon}} \frac{dS}{|v_n|} \right) \delta \epsilon, \quad (5.12)$$

откуда для плотности электронных состояний следует выражение

$$v^{III}(\epsilon) = \frac{\delta N^{III}(\epsilon)}{\delta \epsilon} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \oint_{S_{\epsilon}} \frac{dS}{|v_n|}. \quad (5.13)$$

В формулах (5.12) и (5.13) интеграл берется по изоэнергетической поверхности, если она замкнута. Для открытых поверхностей интегрирование ведется в пределах первой зоны Бриллюэна, при этом для замыкания поверхности используются границы зоны.

Выражение (5.13) можно записать и в иной форме. На основании (5.12) число электронных состояний $N^{III}(\epsilon)$ с энергией, меньшей или равной ϵ , составляет

$$v^{III}(\epsilon) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\partial \Delta(\epsilon)}{\partial \epsilon}. \quad (5.14)$$

Аналогичным путем нетрудно получить формулы для $v^{II}(\epsilon)$ и $v^I(\epsilon)$ при произвольном законе дисперсии. Они имеют вид

$$v^{II}(\epsilon) = \frac{2S}{(2\pi\hbar)^2} \oint_{\mathcal{L}_{\epsilon}} \frac{d\mathcal{L}}{|v_n|}, \quad (5.15)$$

$$v^I(\epsilon) = \frac{2L}{2\pi\hbar} \cdot \frac{1}{v(\epsilon)}. \quad (5.16)$$

Здесь S — площадь двумерного кристалла, $\mathcal{L}_{\epsilon}$ — изоэнергетическая кривая, соответствующая энергии ϵ , v_n — скорость электрона по нормали к изоэнергетической кривой, L — длина одномерного кристалла, $v(\epsilon) = \partial \epsilon / \partial p$ — скорость электрона в одномерной решетке.

Выражения (5.13) и (5.14) показывают, что для вычисления плотности состояний $v^{III}(\epsilon)$ необходимо знать закон дисперсии электронов. Однако общее представление о характере функции

$\nu^{\text{III}}(\epsilon)$ можно получить, рассматривая процесс заполнения электронами зоны Бриллюэна. Для наглядности рассмотрим простую кубическую решетку с периодом a . Для такой решетки первая зона Бриллюэна — куб со стороной $2\pi\hbar/a$. Вторая зона Бриллюэна извне ограничена плоскостями, проходящими через ребра куба первой зоны под углами 45° к ее граням. Как известно, такие плоскости, пересекаясь, образуют ромбический додекаэдр (см. рис. 73). Таким образом, вторая зона Бриллюэна состоит из шести четырехгранных пирамид, построенных на каждой грани куба первой зоны. Минимум энергии в первой зоне находится в начале координат импульсного пространства при $\mathbf{p}=0$ (в центре зоны). Вблизи этой точки закон дисперсии электронов приближенно квадратичен и изотропен ($\epsilon = p^2/2m^*$), за плотность состояний ν_1 при увеличении энергии возрастает, как $\epsilon^{1/2}$. При $\epsilon=0$ функция $\nu_1(\epsilon)$ имеет бесконечную производную. С ростом энергии (при увеличении числа электронов) сферическая форма изоэнергетической поверхности начинает искажаться: при переходе с одной поверхности на другую большие приращения величины импульса возникают в направлениях к центрам боковых граней первой зоны (сравнить с рис. 84 и 85). Это означает, что при одном и том же приращении энергии $\delta\epsilon$ приращение объема импульсного пространства (и пропорциональной ему величины $\delta N^{\text{III}}(\epsilon)$) становится больше, чем при квадратичном законе дисперсии. Следовательно, плотность состояний $\nu^{\text{III}}(\epsilon) = \partial N^{\text{III}}(\epsilon)/\partial\epsilon$ начинает возрастать быстрее, чем по закону $\epsilon^{1/2}$ (рис. 152, а).

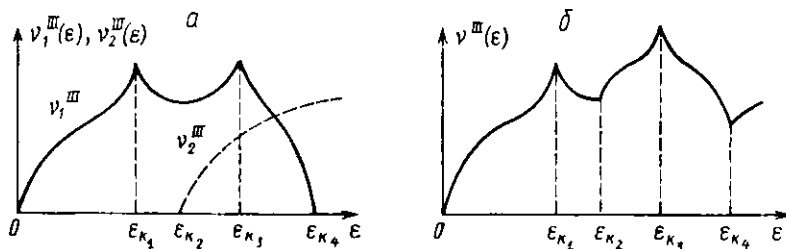


Рис. 152

Плотность состояний в первой зоне $\nu_1^{\text{III}}(\epsilon)$ достигает максимального значения при некоторой энергии $\epsilon = \epsilon_{\kappa_1}$, при которой изоэнергетическая поверхность переходит в открытую. После этого вклад в плотность состояний от изоэнергетической поверхности в первой зоне начинает быстро уменьшаться и $\nu^{\text{III}}(\epsilon)$ резко убывает при $\epsilon > \epsilon_{\kappa_1}$. При некоторой энергии $\epsilon = \epsilon_{\kappa_2} > \epsilon_{\kappa_1}$ начинает заполняться вторая зона Бриллюэна. Точки, соответствующие минимумам энергии во второй зоне, расположены в центрах боковых граней квадратов, ограничивающих первую зону. Поскольку вблизи минимумов энергии закон дисперсии квадратичен, плотность

состояний $v_2^{\text{III}}(\epsilon)$ во второй зоне растет пропорционально $\epsilon^{1/2}$. При $\epsilon = \epsilon_{k_2}$

$$\partial v_2^{\text{III}}(\epsilon)/\partial \epsilon = \infty. \quad (5.17)$$

Дальнейшее увеличение энергии приводит к тому, что при $\epsilon = \epsilon_{k_2} > \epsilon_{k_1}$ изоэнергетическая поверхность в первой зоне вновь переходит в закрытую. Для того чтобы открытая поверхность, изображенная на рис. 112, перешла в закрытую, необходимо, чтобы открытые траектории, возникающие в результате сечения поверхности некоторыми плоскостями, стали замкнутыми. Нетрудно заметить, что открытые траектории на поверхности типа «монстр» (см. рис. 112) образуются при сечении ее плоскостями, проходящими через оси p_x , p_y или p_z под некоторым углом α к плоскостям (p_y, p_z) , (p_x, p_z) или (p_x, p_y) соответственно. При увеличении энергии (с ростом числа электронов) увеличивается толщина «шек» и уменьшается интервал углов α , в котором существуют открытые траектории. Открытые траектории исчезнут, когда изоэнергетические поверхности в соседних ячейках сомкнутся в точках A'' (расположенных в плоскостях, соответствующих $\alpha = 45^\circ$), т. е. в направлении линий типа AA' (см. рис. 111, 113), соединяющих центры соседних ячеек в плоскостях (p_x, p_y) , (p_x, p_z) и (p_y, p_z) . Линии типа AA' проходят через центры ребер куба первой зоны Бриллюэна. Напомним, что через эти же ребра перпендикулярно линиям AA' проходят плоскости, ограничивающие извне вторую зону. Поэтому по мере приближения изоэнергетической поверхности к точкам A'' усиливается влияние дисперсии, в результате чего поверхность более быстро по сравнению с другими направлениями начинает приближаться к точкам A'' . Это приводит, как и при $\epsilon \rightarrow \epsilon_{k_1}$, к возрастанию плотности состояний $v_1^{\text{III}}(\epsilon)$ в первой зоне. При $\epsilon = \epsilon_{k_2}$ плотность состояний $v_1^{\text{III}}(\epsilon)$ достигает второго максимума. При $\epsilon > \epsilon_{k_2}$ поверхность в первой зоне вновь становится закрытой, роль дисперсии уменьшается и $v_1^{\text{III}}(\epsilon)$ убывает.

После того как поверхности сомкнулись в точках A'' , в первой зоне Бриллюэна остались незаполненными лишь одни углы зоны, в которых образовались замкнутые изоэнергетические поверхности дырочного типа. При увеличении энергии их объем уменьшается и обращается в нуль при некотором значении $\epsilon = \epsilon_{k_4}$, при котором 1-я зона целиком заполняется электронами. Вблизи максимального значения энергии в 1-й зоне, соответствующего $\epsilon = \epsilon_{k_4}$, закон дисперсии дырок квадратичен и плотность состояний при $\epsilon \leq \epsilon_{k_4}$ изменяется пропорционально $(\epsilon_{k_4} - \epsilon)^{1/2}$ (рис. 152, а).

Общая плотность состояний является суммой плотностей состояний в зонах. Для рассмотренного случая плотность состояний в интервале энергии $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_{k_4}$, равная $v_1^{\text{III}}(\epsilon) + v_2^{\text{III}}(\epsilon)$, представлена на рис. 152, б.

Если теперь двигаться по шкале энергии обратно, т. е. в сторону уменьшения энергии, то вертикальный излом при $\epsilon = \epsilon_{k_4}$

означает появление замкнутых дырочных изоэнергетических поверхностей. Пик при $\epsilon = \epsilon_k$ соответствует разрыву перемычек у изоэнергетической поверхности в точках A'' и образованию открытых траекторий. Вертикальный излом при $\epsilon = \epsilon_{k_2}$ означает исчезновение электронных поверхностей во 2-й зоне. Пик при $\epsilon = \epsilon_k$ соответствует разрыву перемычек на серединах граней 1-й зоны и исчезновению открытых траекторий, т. е. переходу открытой поверхности в закрытую. При $\epsilon = 0$ исчезают носители в 1-й зоне.

Для сложных кристаллических решеток усложняется и вид функции $\nu^{III}(\epsilon)$. При этом на кривой $\nu^{III}(\epsilon)$ могут появляться дополнительные особенности.

Из проведенного выше рассмотрения следует, что вид функции $\nu(\epsilon)$ определяется только особенностями зонной структуры кристалла. Поэтому полученную таким путем плотность электронных состояний принято называть зонной плотностью. Зонная плотность в литературе обозначается обычно индексами bs : $\nu_{bs}(\epsilon)$. Величина зонной плотности состояний $\nu_{bs}^{III}(\epsilon)$ вблизи экстремальных точек определяется эффективной массой плотности состояний m_d^* в степени $3/2$ (см. (5.4)).

Естественно считать, что и в общем случае зонная плотность состояний определяется также некоторым интегральным параметром размерности массы, общим для всех квазичастиц на поверхности Ферми, который можно назвать эффективной зонной массой плотности состояний m_{dbs}^* . В частности, для двумерной системы плотность состояний при произвольном законе дисперсии пропорциональна эффективной циклотронной массе, определяемой выражением (3.29).

Это видно непосредственно из сопоставления интеграла в выражении (3.27), которым с точностью до коэффициента пропорциональности $1/2\pi$ определяется эффективная циклотронная масса m_c^* с идентичным ему, по сути, интегралом, которым определяется $\nu^{II}(\epsilon)$ в формуле (5.16).

Отсюда следует, что

$$\nu^{II}(\epsilon) = \frac{2S_{кр}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{\partial S}{\partial \epsilon} = \frac{4\pi S_{кр}}{(2\pi\hbar)^2} m_c^* = \frac{S_{кр}}{\pi\hbar^2} m_c^*,$$

где, чтобы избежать недоразумения, через $S_{кр}$ обозначена общая площадь двумерного кристалла, а через S — площадь p -пространства, заключенная внутри изоэнергетической кривой $\mathcal{E}_\epsilon$, соответствующей энергии ϵ .

Выражение для $\nu^{II}(\epsilon)$ легко получить и непосредственно, рассматривая изменение числа электронных состояний $dN^{II}(\epsilon)$ при возрастании энергии на $d\epsilon$. Пусть при этом изменение площади, занятой электронами в p -пространстве, равно dS . Тогда

$$dN^{II}(\epsilon) = \frac{2S_{кр}}{(2\pi\hbar)^2} dS,$$

откуда непосредственно следует выражение для $\nu^{II}(\epsilon)$.

§ 3. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Плотность электронных состояний $\nu(\epsilon)$ позволяет определить величину электронной теплоемкости $c_e(T)$ металла.

Выше указывалось, что в условиях термодинамического равновесия средняя тепловая добавка к фермиевской энергии каждого из электронов, расположенных в тонком слое вблизи энергии Ферми, составляет $\sim kT$. Ширина этого слоя (по энергии) определяется величиной теплового размытия границы фермиевского распределения электронов, которая близка к $2kT$. Тогда тепловая энергия электронной системы равна произведению средней тепловой энергии электрона ($\sim kT$) на число электронов, находящихся в области размытия фермиевской границы. Это число равно плотности электронных состояний на уровне Ферми $\nu(\epsilon_F)$, умноженной на ширину области размытия, т. е. $\sim \nu(\epsilon_F) 2kT$. Общая тепловая энергия $u_e(T)$ термически возбужденных электронов составляет

$$u_e(T) \simeq \nu(\epsilon_F) 2kT \cdot kT = 2k^2 T^2 \nu(\epsilon_F). \quad (5.18)$$

Электронная теплоемкость c_e единицы объема металла равна

$$c_e(T) = du_e(T)/dT \simeq 4k^2 T \nu(\epsilon_F). \quad (5.19)$$

В общем случае плотность энергии электронов в металле должна быть рассчитана по формуле

$$u_e(T) = \int_0^\infty \epsilon f(\epsilon, T) \nu(\epsilon) d\epsilon, \quad (5.20)$$

где $f(\epsilon, T)$ — функция распределения Ферми—Дирака (см. (1.7)). С точностью до членов $\sim T^2$ из выражения (5.20) следует, что

$$u_e(T) \simeq u_e(0) + \frac{\pi^2}{6} \nu(\epsilon_F^0) (kT)^2. \quad (5.21)$$

Последнее выражение показывает, что удельная энергия электронов в металле при температуре T складывается из удельной энергии частиц, подчиняющихся статистике Ферми—Дирака, при $T=0$ К и энергии термически возбужденных электронов, расположенных вблизи уровня Ферми. Тогда

$$c_e(T) = \frac{du_e(T)}{dT} \simeq \frac{\pi^2}{3} k^2 \nu(\epsilon_F) \cdot T. \quad (5.22)$$

Более точное выражение (5.22) для $c_e(T)$ практически идентично выражению (5.19), полученному выше на основе простых качественных соображений. Для металла с квадратичным законом дисперсии электронов

$$c_e(T) = \frac{\pi^2}{2} kn \frac{kT}{\epsilon_F^0}. \quad (5.23)$$

Выражение (5.23) является строгим при $kT \ll \epsilon_F^0$. Оно показывает, что электронная теплоемкость в металле составляет малую долю порядка $\sim kT/\epsilon_F^0$ от теплоемкости $3k\pi$ классического газа частиц с концентрацией n .

Сопоставление формулы (5.23) для электронной теплоемкости c_e металла, в котором на каждый атом приходится z валентных электронов, с формулой Дебая (4.7) ч. I для теплоемкости решетки c_D^{III} при низких температурах $T \ll \bar{\theta}_D$ показывает, что c_D^{III} становится равной c_e при температуре

$$T' \simeq 0,145 \sqrt{z \frac{k \bar{\theta}_D}{\epsilon_F^0} \bar{\theta}_D}. \quad (5.24)$$

При $T < T'$ основной вклад в теплоемкость металла вносят электроны.

Оценим температуру T' для нормальных металлов. Полагая

$$z=1, \epsilon_F \sim p_F^2/2m_0 \sim \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\pi \hbar}{a} \right)^2 \text{ и } \bar{\theta}_D \sim \frac{2\hbar v_{zv}}{a}$$

при $v_{zv} \simeq 10^5$ см/с и $a \simeq 10^{-8}$ см, получим $T'/\bar{\theta}_D \sim 3 \cdot 10^{-3}$ и $T' \sim 0,5$ К. Это означает, что электронная теплоемкость в нормальных металлах начинает преобладать над решеточной при температурах, составляющих доли градуса Кельвина.

§ 4. ПЕРЕНОРМИРОВКА ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В РЕЗУЛЬТАТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕКТРОНОВ С РЕШЕТКОЙ

До сих пор мы рассматривали движение квазичастицы (электрона) с зарядом $-|e|$ и массой m' в поле неподвижных ионов кристаллической решетки. Появление массы m' вместо массы m_0 свободного электрона явилось следствием рассмотрения ферми-жидкостной модели, учитывающей сильное электрон-электронное взаимодействие (см. § 2 гл. 1).

Увеличение массы электрона в результате электрон-электронного взаимодействия описывается коэффициентом μ :

$$m' = (1 + \mu) m_0. \quad (5.25)$$

Величина коэффициента μ может быть оценена теоретически. Она различна для разных металлов, однако на основании существующих расчетов, по-видимому, можно считать, что для большинства металлов $\mu \leq 0,1$.

Взаимодействие квазичастиц с решеткой привело к формированию сложного энергетического спектра и к понятию эффективной массы, характеризующей движение электрона в различных зонах во внешних электрическом и магнитном полях. Эффективная масса электрона может варьироваться в очень широких пределах: от $(10^{-6} - 10^{-2}) m_0$ до нескольких m_0 .

Интересно, что величина эффективного потенциала значительно слабее влияет на величину эффективной циклотронной массы, чем на форму изоэнергетических поверхностей. Поэтому рассмотрение любого числа ортогонализированных плоских волн (ОПВ) вносит лишь очень малую поправку в величину m_{bs}^* , рассчитанную в предположении, что $|V_{эф}|=0$. Поправка на нелокальность псевдопотенциала также оказывается малой. Таким образом, зонная масса m_{bs}^* , рассчитанная методом псевдопотенциала с учетом электрон-электронного взаимодействия, нелокальности псевдопотенциала и большого числа ОПВ, лишь незначительно отличается от результатов расчета в нулевом приближении при $|V_{эф}|=0$ (см., например, рис. 136). То же самое можно сказать и о зонной плотности состояний $\nu_{bs}(\epsilon)$.

Рассмотрим теперь, как сказывается то обстоятельство, что ионы решетки в действительности не закреплены жестко в узлах и могут смещаться в результате взаимодействия с электронами.

Пусть электрон движется в кристаллической решетке, образованной положительно заряженными ионами. Для наглядности будем считать, что электрон движется в направлении одной из кристаллографических осей по каналу, образованному цепочками ионов в этом направлении (рис. 153). Так как радиус электрон-

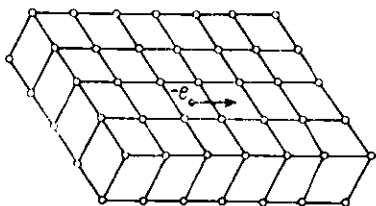


Рис. 153

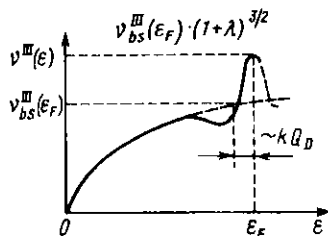


Рис. 154

ионного взаимодействия в результате экранирования очень мал, то электрон, пролетая мимо соседних ионов с фермиевской скоростью $v_F \sim 10^8$ см/с, сообщает им короткий импульс силы. Получив этот импульс силы, ионы начинают двигаться в направлении, перпендикулярно движению электрона. Частота собственных колебаний ионов $\lesssim 10^{13}$ с⁻¹ (см. § 3 гл. 1 ч. I) и, следовательно, период их колебаний $T \gtrsim 10^{-13}$ с. Электрон же пролетает межатомное расстояние $a \sim 10^{-8}$ см за время 10^{-16} с. Поэтому электрон, вызвавший движение ионов, успевает значительно сместиться вперед к тому времени, когда ионы, двигаясь под действием импульса силы, максимально приблизятся к тому месту, где электрон находился в момент взаимодействия. В результате за движущимся электроном образуется следующая за ним на некотором расстоянии область сжатия решетки, обладающая избыточным положительным зарядом. Наличие такой области, очевидно, тормозит

движение электрона в решетке и приводит к изменению массы электрона: под действием внешней силы электрон в решетке движется как более тяжелая частица. Наличие в решетке других фермиевских электронов, которые двигаются хаотически и не коррелированно с данным электроном, ослабляет эффект поляризации, так как они могут растянуть решетку в том месте, где ее сжимает рассмотренный электрон. Однако вероятность полной компенсации эффекта поляризации решетки мала.

Смещение ионов решетки под влиянием сил взаимодействия с электронами можно рассматривать как возбуждение (рождение) фононов.

Отметим, что эффект поляризации решетки приводит к возникновению сил притяжения между электронами: два электрона, разделенные положительно заряженной областью сжатия решетки, притягиваются друг к другу. В этом случае говорят об электрон-электронном взаимодействии, обусловленном фононами. Притяжение электронов, обусловленное фононами, может приводить при определенных условиях к образованию куперовских пар и сверхпроводимости. Поэтому энергия связи куперовской пары и увеличение массы электрона в результате поляризации решетки определяются одним и тем же параметром λ , характеризующим величину поляризационного (электрон-электронного) взаимодействия в решетке кристалла.

Истинная эффективная циклотронная масса на поверхности Ферми связана с соответствующей зонной массой соотношением

$$m^* = (1 + \lambda) m_{bs}^*. \quad (5.26)$$

Поскольку эффективная масса на поверхности Ферми определяет величину плотности состояний, истинная плотность состояний при $\varepsilon = \varepsilon_F$ увеличивается в $(1 + \lambda)^{3/2}$ раз:

$$\nu^{III}(\varepsilon) = (1 + \lambda)^{3/2} \nu_{bs}^{III}(\varepsilon). \quad (5.27)$$

Обратим внимание на то, что взаимодействовать с фононами могут только электроны, расположенные вблизи поверхности Ферми в слое толщиной порядка максимальной энергии фононов. При поляризации решетки возбуждаются собственные колебания ионов с энергией $\hbar\omega_0$ и, следовательно, весь спектр фононов вплоть до предельной, дебаевской, частоты (см. § 3 гл. 1 ч. I). Энергия дебаевских фононов, как указывалось выше, равна $\hbar\bar{\theta}_D$. Таким образом, поляризационный эффект увеличения эффективной массы электронов в решетке имеет место только для электронов, находящихся в тонком слое вблизи поверхности Ферми шириной порядка $\hbar\bar{\theta}_D$. Он приводит к увеличению зонной плотности состояний вблизи граничной энергии Ферми. Качественный вид функции $\nu^{III}(\varepsilon)$, построенной для квадратичного закона дисперсии с учетом электрон-фононного взаимодействия, изображен на рис. 154. Пик плотности состояний вблизи энергии $\varepsilon = \varepsilon_F$ соответ-

существует слою электронов с увеличенной эффективной массой, образующихся в результате электрон-фононного взаимодействия.

Из рассмотренной достаточно грубой модели увеличения эффективной массы электронов в результате поляризации решетки можно тем не менее сделать важные выводы о величине параметра λ .

Во-первых, импульс силы, возникающий в результате притяжения иона к электрону, эквивалентен удару, который возбуждает весь спектр колебаний в решетке вплоть до предельной частоты ω_0 собственных колебаний ионов. Поэтому эффект поляризации должен зависеть от структуры всего фононного спектра, т. е. от вида функции $D(\omega)$ спектральной плотности фононов. Во-вторых, величина поляризации решетки должна зависеть от массы M ионов и частоты их собственных колебаний. Очевидно, при $M \rightarrow \infty$ эффект поляризации должен исчезнуть, а величина λ обратиться в нуль (при $M \rightarrow \infty$ мы переходим к модели неподвижных, жестко закрепленных в узлах ионов решетки).

Согласно теоретическому расчету

$$\lambda = 2 \int_0^{\infty} \frac{D(\omega)}{\omega} \alpha^2(\omega) d\omega, \quad (5.28)$$

где $\alpha(\omega)$ — зависящая от частоты фонона константа электрон-фононного взаимодействия. Расчетные значения λ для Na, Al и Pb соответственно составляют 0,19; 0,50 и 1,6.

Следует подчеркнуть, что электрон-электронное взаимодействие, обусловленное фононами, не изменяет размеров поверхности Ферми, так как последние определяются только концентрацией коллективизированных электронов и структурой кристаллической решетки. В результате электрон-электронного взаимодействия вблизи поверхности Ферми возникает тонкий (толщиной $\sim k\theta_D$) слой электронов с увеличенной эффективной массой и пик плотности $\nu(\epsilon)$ электронных состояний. Скорость электронов на поверхности Ферми уменьшается в $(1+\lambda)^{3/2}$ раз. Это видно из следующего рассмотрения, справедливого для сферической поверхности Ферми. По определению скорости

$$|\mathbf{v}| = \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \epsilon}{\partial N} \cdot \frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}},$$

откуда

$$|\mathbf{v}| = \frac{\frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}}}{\nu(\epsilon)} = \frac{\frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}}}{v_{\text{вс}}(\epsilon) (1+\lambda)^{3/2}}.$$

Величина производной $\frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}}$, очевидно, не зависит от эффекта поляризации решетки (ибо на каждое электронное состояние прихо-

дится один и тот же объем р-пространства). Следовательно, по сравнению с величиной скорости, найденной без учета поляризации, истинная скорость уменьшается в $(1+\lambda)^{3/2}$ раз.

Итак, в результате электрон-электронного взаимодействия, обусловленного фононами, перенормируются:

- эффективная масса $m^* = m_{bs}^* (1 + \lambda)$;
- плотность электронных состояний $\nu^{III}(\epsilon) = \nu_{bs}^{III}(\epsilon) (1 + \lambda)^{3/2}$;
- фермиевская скорость электрона $v_F = \frac{v_{Fbs}}{(1 + \lambda)^{3/2}}$;
- электронная теплоемкость $c_e = c_{ebs} (1 + \lambda)^{3/2}$.

Глава 6

КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

§ 1. ЭЛЕКТРОН В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Циклический характер движения электрона в магнитном поле **H** является причиной того, что его энергия, связанная с движением в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, становится дискретной величиной, или, как говорят, квантуется. Впервые это было показано Л. Д. Ландау в 1930 г. при нахождении уровней энергии электрона в постоянном однородном магнитном поле.

Рассмотрим вначале идеальный газ электронов, заключенных в прямоугольный потенциальный ящик размерами L_x , L_y и L_z вдоль осей x , y и z . В идеальном газе электроны не взаимодействуют между собой, и поэтому энергетический спектр всей системы можно построить в одноэлектронном приближении, т. е. анализируя движение только одного электрона.

Как уже отмечалось в § 1 гл. 1, компоненты импульса электрона, заключенного в потенциальный ящик, становятся квазинепрерывными величинами (см. 1.4).

Энергия электрона становится квазинепрерывной функцией импульса (см. (1.5)), хотя и описывается той же формулой, что и энергия свободной частицы:

$$\epsilon = \epsilon(p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_0}. \quad (6.1)$$

Разделим энергию электрона на две составляющие:

$$\epsilon = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_0} + \frac{p_z^2}{2m_0} = \epsilon_{\perp} + \epsilon_{\parallel} \quad (6.2)$$

и будем рассматривать отдельно движение электрона в направлении оси z и в плоскости (x, y) , перпендикулярной этой оси.

Движение электрона в плоскости (x, y) эквивалентно движению частицы в пространстве двух измерений. Как было показано выше (см. § 1 гл. 4), плотность состояний $\gamma^H(\varepsilon)$ свободных электронов в двумерном пространстве является постоянной величиной, которая определяется формулой (5.7). В таком случае разрешенные значения энергии электрона образуют систему эквидистантных квазинепрерывных уровней энергии (левая часть рис. 155). Каждый энергетический уровень системы сильно вырожден: одно и то же значение энергии соответствует большому числу электронных состояний. Однако это не означает, что принцип Паули не выполнен, так как в состоянии с заданной энергией находятся электроны с различными значениями компонент p_x и p_y импульса (сумма квадратов которых равна постоянной величине $2m_0\varepsilon_\perp$), т. е. с различными квантовыми числами n_x и n_y .

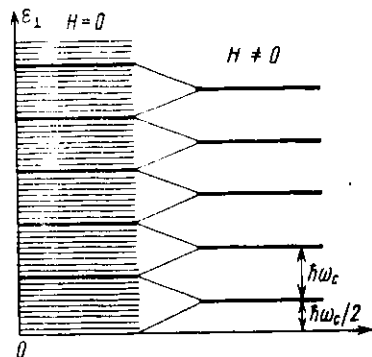


Рис. 155

Посмотрим теперь, как изменится энергетический спектр, если рассматриваемую систему электронов поместить в постоянное однородное магнитное поле $\mathbf{H}$, направленное вдоль оси z .

Известно, что магнитное поле не меняет продольную составляющую движения электрона. Связанная с ней энергия $\varepsilon_\parallel$ электрона, как и при $\mathbf{H}=0$, будет равна $p_z^2/2m_0$.

В плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$, электроны начинают прецессировать по окружности радиуса $r_H = \frac{m_0 c v_\perp}{|e| H}$ ($v_\perp$ — компонента скорости электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю) с циклотронной частотой $\omega_c = \frac{|e| H}{m_0 c}$. Энергия всякого

периодического движения (например, движения электрона по атомным орбитам) квантуется. Если не рассматривать пока собственный магнитный момент электрона, связанный со спином, и использовать известное из квантовой механики выражение для энергии осциллятора, то можно это выражение представить в виде

$$\varepsilon = \varepsilon_\perp + \varepsilon_\parallel = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0}. \quad (6.3)$$

Отсюда видно, что для энергии $\varepsilon_\perp$ поперечного движения электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, допустимы только дискретные значения $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$, которые отстоят

друг от друга на величину циклотронного кванта $\hbar\omega_c$. Энергия продольного движения

$$\epsilon_{\parallel} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2\pi\hbar}{L_z} \right)^2 n_z^2 \quad (6.4)$$

является квазинепрерывной величиной.

Поскольку все электроны прецессируют с одной и той же циклотронной частотой ω_c , энергетический спектр одного электрона определяет энергетический спектр всей системы.

Переход от квазинепрерывного спектра $\epsilon_{\perp}(p_x, p_y)$ при $H=0$ к дискретному $\epsilon_{\perp}(n)=\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$ при $H \neq 0$ иллюстрируется рис. 155. Полосы квазинепрерывного спектра $\epsilon_{\perp}$ при $H=0$ шириной $\hbar\omega_c$ при $H \neq 0$ стягиваются в дискретные энергетические уровни $\epsilon_{\perp}(n)$. Центр тяжести каждой полосы при этом остается на своем месте. Степень вырождения каждого энергетического уровня $\epsilon_{\perp}(n)$ в магнитном поле становится значительно более высокой по сравнению со степенью вырождения уровней ϵ при $H=0$: на уровне $\epsilon_{\perp}(n)$ с данным значением n находятся все электроны, которые при $H=0$ находились на всех квазинепрерывных уровнях в полосе шириной $\hbar\omega_c$. Число электронов ΔN в полосе $\hbar\omega_c$ равно произведению постоянной плотности состояний $\nu^{\parallel} = \frac{S_{\text{кр}}}{\pi\hbar^2} m_0$ ($S_{\text{кр}} = L_x L_y$) на ширину полосы $\hbar\omega_c$:

$$\Delta N = \frac{L_x L_y}{\pi\hbar^2} m_0 \hbar\omega_c = \frac{|e|\hbar}{\pi\hbar c} H L_x L_y \quad (6.5)$$

Число ΔN определяет степень вырождения энергетических уровней $\epsilon_{\perp}(n)$ в магнитном поле. Дискретные уровни энергии $\epsilon_{\perp}(n)$ электронов в магнитном поле получили название уровней Ландау. Каждому уровню Ландау соответствует определенное значение квантового числа $n=0, 1, 2, \dots$.

Заметим, что высокая степень вырождения уровней Ландау не связана с нарушением принципа Паули, так как в состоянии с заданной энергией $\epsilon_{\perp}(n)$ и с фиксированным значением k_z находятся электроны, которые отличаются между собой значением других квантовых чисел.

Дискретным значением энергии $\epsilon_{\perp}(n) = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$ циклического движения в квазиклассическом приближении*) соответствует

*) Квазиклассическое приближение, при котором движение квантовой частицы может быть описано как движение по определенной траектории, остается справедливым до тех пор, пока длина волны λ_B де Бройля электрона много меньше характерных размеров (в данном случае радиуса r_H) орбиты. Как было показано в § 2 гл. 3, условие $\lambda_B \ll r_H$ эквивалентно выполнению неравенства $\hbar\omega_c \ll \epsilon_F$.

вуют дискретные значения r_{Hn} , зависящие от квантового числа n . Для нахождения r_{Hn} сопоставим между собой классическое и квантовое выражение для энергии $\epsilon_{\perp}$:

$$\epsilon_{\perp}^{\text{кл}} = \frac{m_0 \omega_c^2 r_{Hn}^2}{2} \text{ и } \epsilon_{\perp}^{\text{кв}} = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Сравнение этих величин показывает, что для радиуса квазиклассической орбиты разрешенными являются значения

$$r_{Hn} = \sqrt{\frac{2\hbar c}{m_0 \omega_c} \left(n + \frac{1}{2} \right)} = \sqrt{\frac{2c\hbar}{|e| H} \left(n + \frac{1}{2} \right)}. \quad (6.6)$$

Для того чтобы электрон с орбиты радиуса r_{Hn} перешел на орбиту радиуса r_{Hn+1} , ему необходимо сообщить энергию, равную величине циклотронного кванта $\hbar \omega_c$.

В состоянии, соответствующем определенному значению квантового номера n , электроны движутся по орбитам одинакового радиуса r_{Hn} и обладают одним и тем же значением энергии $\epsilon_{\perp}(n) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$. Электроны в этом состоянии могут отличаться величиной квантового числа n_z , определяющего проекцию импульса p_z на направление магнитного поля, а также расположением центра орбиты на плоскости (x, y) .

Выясним теперь, как изменится энергетический спектр электрона (6.3), если принять во внимание его спин. Известно, что со спином связан магнитный момент μ электрона, равный по величине магнетону Бора $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0c}$. Энергия магнитного момента в поле $\mathbf{H}$ равна $-(\mu \mathbf{H})$.

Собственный магнитный момент μ в магнитном поле может быть ориентирован как в направлении $+\mathbf{H}$, так и в направлении $-\mathbf{H}$. Учет энергии $-(\mu \mathbf{H})$ приводит к расщеплению уровней Ландау на два подуровня, соответствующих двум возможным ориентациям μ по отношению к вектору $\mathbf{H}$. Из этих двух подуровней меньшей энергией обладает тот, на котором магнитный момент μ электрона совпадает по своему направлению с $\mathbf{H}$.

Выражение (6.3) для энергии ϵ электрона в магнитном поле с учетом спинового расщепления уровней энергии приобретает вид

$$\epsilon = \epsilon(n, s, k_z) = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + s \mu_B H + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_0}, \quad (6.7)$$

где s — спиновое квантовое число, принимающее значения ± 1 .

Таким образом, энергетический спектр электрона в магнитном поле определяется главным квантовым числом n , спиновым квантовым числом s и величиной проекции p_z его импульса на направ-

ление магнитного поля, которая определяется квантовым числом n_z .

С учетом спина электрона нумерация уровней Ландау производится при помощи двух квантовых чисел n и s . Значения $s=+1$ и $s=-1$ обычно принято изображать значками «+» и «-» около соответствующего номера n . При таком обозначении самым нижним уровнем является уровень 0^- .

Обратим внимание на то, что для свободного электрона в магнитном поле величина спинового расщепления уровней, равная $2\mu_B H$, совпадает с расстоянием $\hbar\omega_c$ между уровнями Ландау, построенными без учета спина электрона*).

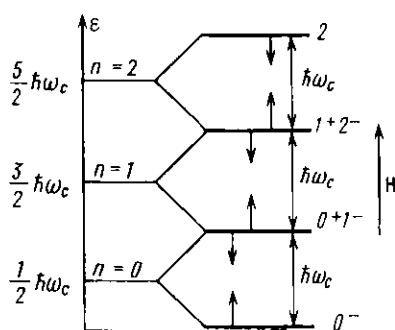


Рис. 156

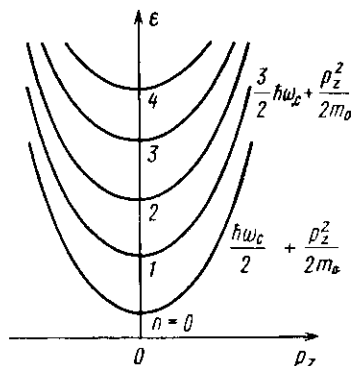


Рис. 157

Возникает своеобразная ситуация: спиноое расщепление снимает вырождение уровней Ландау с одним и тем же значением n , однако при этом возникает вырождение уровней, соответствующих квантовым числам $(n, s=+1)$ и $(n+1, s=-1)$. Переход от системы уровней Ландау без учета спина к системе уровней с учетом спинового расщепления иллюстрирует рис. 156. Видно, что вырождение, связанное со спином, отсутствует только на уровне 0^- .

Спектр разрешенных значений энергии электрона в магнитном поле представляет собой совокупность парабол $p_z^2/2m_0$, сдвинутых относительно друг друга по оси энергии на расстояние, равное $\hbar\omega_c$ (рис. 157). Как и уровни Ландау, каждое состояние на параболе сильно вырождено.

Подчеркнем одно весьма важное обстоятельство. Энергия электрона в магнитном поле непрерывно зависит только от одной координаты p_z импульса. Вследствие этого система электронов в магнитном поле имеет многие черты одномерной системы. Дви-

*) Поскольку образование уровней Ландау связано с движением электрона по орбите, расстояние $\hbar\omega_c$ между уровнями Ландау иногда называют орбитальным расщеплением.

жение квазичастицы в металле, находящемся в магнитном поле, имеет специфические особенности.

Во-первых, циклическое движение электронов в металле возможно лишь в том случае, если длина свободного пробега l превосходит размеры электронной орбиты $cr_F/|e|H$ в плоскости, перпендикулярной магнитному полю. Вследствие этого величина квантующего магнитного поля ограничена снизу некоторым значением H_l , зависящим от l , при котором характерный размер $cr_F/|e|H$ орбиты сравняется с l . Напомним оценку такого значения магнитного поля, которая была получена в § 2 гл. 3:

$$H_l \sim \frac{a}{l} H_a \sim \frac{a}{l} (10^8 \div 10^9) \text{ Э.}$$

Обычно по этому признаку магнитные поля делятся на сильные и слабые: к сильным относятся поля, для которых $H > H_l$, и, наоборот, к слабым — те, для которых $H < H_l$.

Во-вторых, форма траектории движения электрона в металле определяется сечением поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной H . Для изоэнергетической поверхности достаточно сложного вида при каждом направлении поля существует одновременно большое разнообразие орбит, отличающихся по форме и размерам. Частота $\omega_c = |e|H/m_c^*c$ прецессии на каждой из орбит определяется соответствующим значением эффективной циклотронной массы, величина которой зависит от p_z : $m_c^* = m_c^*(p_z)$. При изменении ориентации поля характер орбит изменяется (см., например, рис. 126). Направление прецессии электрона зависит от знака эффективной массы m_c^* . Для односвязных изоэнергетических поверхностей электронного типа ($m_c^* > 0$) направление движения совпадает с направлением прецессии свободного электрона. Для односвязных поверхностей дырочного типа ($m_c^* < 0$) электроны прецессируют в противоположном направлении. У многосвязных (типа «торонд») и открытых поверхностей (типа «монстр») существуют одновременно траектории электронного и дырочного типов, по которым электроны прецессируют в противоположных направлениях. Зависимость составляющей энергии ϵ_1 от p_z становится функцией ориентации магнитного поля и в общем случае может иметь сложный вид.

В-третьих, величина спинового расщепления $\Delta\epsilon_s$ уровней Ландау в металлах может сильно отличаться от величины $2\mu_B H$ для свободных электронов. У сложных изоэнергетических поверхностей величина $\Delta\epsilon_s$ является функцией p_z и направления магнитного поля. Это означает, что каждой траектории электрона соответствует определенная величина $\Delta\epsilon_s$:

$$\Delta\epsilon_s = \Delta\epsilon_s \left(p_z, \frac{H}{H} \right).$$

Обычно спиновое расщепление $\Delta\epsilon_s$ выражается в единицах $\mu_B H$:

$$\Delta\epsilon_s = g\mu_B H. \quad (6.8)$$

Коэффициент пропорциональности g в соотношении (6.8) получил название g -фактора.

Для свободного электрона $g=2$. У электронов в металле g -фактор может существенно отличаться от 2 как в меньшую, так и в большую сторону; g -фактор различен и для разных групп электронов в одном и том же металле; g -фактор обычно сильно зависит от направления магнитного поля $\mathbf{H}$ и величины ρ_z . Таким образом, g -фактор является новой характеристикой электронов в металле и подлежит экспериментальному определению наряду с другими характеристиками, такими, например, как эффективная циклотронная масса, размер и форма поверхности Ферми и т. д.

Из сказанного следует, что картина квантования энергии электронов с произвольным законом дисперсии необычайно сложна. Теоретическое рассмотрение этого вопроса представляет очень трудную задачу, общее решение которой в настоящее время не найдено. Аналитическое выражение для энергии электронов в магнитном поле может быть получено только для простейших моделей спектра.

Рассмотрим одну из таких моделей. Будем считать, что закон дисперсии квадратичен, а поверхность Ферми — трехосный эллипсоид (см. (3.32)).

Энергия электрона с законом дисперсии (3.32) в магнитном поле $\mathbf{H}$ произвольного направления распадается на сумму квантованной энергии движения $\epsilon_{\perp}$ в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$ и квазипрерывной составляющей $\epsilon_{\parallel}$ энергии продольного движения. Циклотронная масса m_c^* , определяющая величину кванта циклотронной частоты $\hbar\omega_c$, при произвольной ориентации $\mathbf{H}$ относительно главных осей эллипсоида (3.32) описывается выражением (3.37), из которого следует, что m_c^* зависит только от углов α, β, γ , задающих ориентацию $\mathbf{H}$, но не зависит от величины проекции импульса $p_{\parallel}$ электрона на направление $\mathbf{H}$. Это означает, что при квадратичном анизотропном спектре (3.32) все фермиевские электроны имеют одну и ту же циклотронную частоту. Энергию движения электрона вдоль направления магнитного поля $\epsilon_{\parallel} = p_{\parallel}^2/2m_{\parallel}^*$, определяет продольная эффективная масса $m_{\parallel}^*$, равная

$$m_{\parallel}^* = m_x \cos^2 \alpha + m_y \cos^2 \beta + m_z \cos^2 \gamma. \quad (6.9)$$

Масса $m_{\parallel}^*$, так же как и m_c^* , зависит только от ориентации магнитного поля $\mathbf{H}$.

Напомним, что в § 2 гл. 5 была введена эффективная масса плотности состояний m_d^* , равная $(m_x m_y m_z)^{1/3}$. Согласно (3.37) и (6.9), три эффективные массы электронов $m_c^*, m_{\parallel}^*$ и m_d^* связаны между собой выражением

$$(m_d^*)^3 = m_{\parallel}^* (m_c^*)^2. \quad (6.10)$$

Таким образом, энергетический спектр электрона с законом дисперсии (3.32) в магнитном поле (без учета спина) имеет вид

$$\epsilon(n, p_{\parallel}) = \hbar \frac{|e| \hbar}{m_c^* c} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*}. \quad (6.11)$$

Как и в случае свободных электронов, для того чтобы учесть спиновое расщепление (6.8) уровней Ландау, в выражение для энергии (6.11) необходимо добавить член $\frac{1}{2} g \mu_B H$. При квадратичном законе дисперсии величина g -фактора определяется только ориентацией магнитного поля $\mathbf{H}$ и не зависит от проекции $p_{\parallel}$ импульса.

Зависимость энергии ϵ электрона с законом дисперсии (3.32) в магнитном поле от главного квантового числа n , спинowego квантового числа s и проекции $p_{\parallel}$ импульса на направление магнитного поля может быть записана в виде

$$\epsilon(n, s, p_{\parallel}) = \hbar \frac{|e| \hbar}{m_c^* c} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} g \mu_B H + \frac{p_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}^*}, \quad (6.12)$$

где m_c^* и $m_{\parallel}^*$ определяются формулами (3.37) и (6.9).

Ввиду того что квазичастицы в металле образуют идеальный газ элементарных возбуждений, выражение (6.12) описывает энергию всех электронов с законом дисперсии (3.32).

Существует несколько иной вид записи выражения (6.8) для спинowego расщепления $\Delta \epsilon_s$. Для этого вводится величина m_s^* с размерностью массы, которая связана с g -фактором соотношением

$$g = 2 \frac{m_0}{m_s^*}. \quad (6.13)$$

Величина m_s^* называется эффективной спиновой массой. С ее помощью $\Delta \epsilon_s$ может быть записано формально так же, как и для свободного электрона:

$$\Delta \epsilon_s = 2 \frac{|e| \hbar}{2m_s^* c} H = 2\mu_B^* H. \quad (6.14)$$

Эффективная спиновая масса m_s^* определяет величину эффективного магнитного момента μ_B^* у электрона в металле (эффективный магнетон).

Использование эффективной спиновой массы очень удобно для сопоставления величин спинowego и орбитального расщепления. При $m_s^* = m_c^*$ спиновое расщепление совпадает с орбитальным. При этом система уровней Ландау у электронов в металле подобна системе уровней для свободного электрона.

На рис. 158 приведены аналогичные рис. 156 диаграммы для трех случаев $m_s^* > m_c^*$, $m_s^* = m_c^*$ и $m_s^* < m_c^*$. При $m_s^* < m_c^*$ спиновое расщепление превосходит орбитальное, что приводит к нарушению порядка следования уровней. В частности, при величине спинового расщепления, показанной на рис. 164, в, энергия состояния с $p_{\parallel} = 0$ на уровне n^+ становится больше энергии состояния

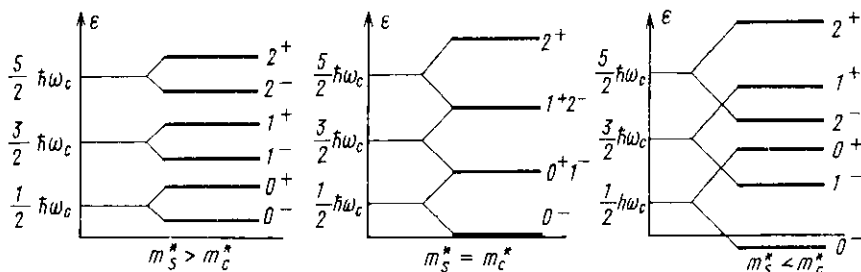


Рис. 158

на уровне $(n+1)^-$. В металлах малое значение эффективной циклотронной массы у какой-либо группы электронов, как правило, сочетается с малым значением эффективной спиновой массы, так что спиноое расщепление $\Delta \epsilon_s$ уровней Ландау обычно по порядку величины совпадает с орбитальным расщеплением $\Delta \epsilon_c = \hbar \omega_c$.

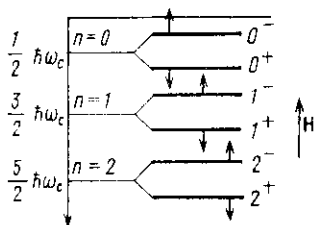


Рис. 159

Остановимся на квантовании энергии квазичастиц в окрестности максимума энергии в зоне, т. е. на квантовании энергии дырок. Циклическое движение дырок происходит в направлении, противоположном движению электронов, а эффективная циклотронная масса дырок отрицательна. Как уже отмечалось, энергия дырок отсчитывается от потолка зоны вниз. В соответствии с этим уровень Ландау дырок с номером n расположен выше уровня с номером $n+1$.

Энергетическая диаграмма дырочных уровней при $p_{\parallel} = 0$ показана на рис. 159. Диаграмма соответствует случаю, когда орбитальное расщепление превосходит спиновое. Сопоставление рис. 158 и 159 показывает, что соответствующие энергетические диаграммы для электронов и дырок отличаются друг от друга только направлением отсчета энергии.

Выражение для энергии дырок в магнитном поле с учетом спинового расщепления уровней тождественно выражению (6.12) для энергии электрона, где под ϵ , m_c^* и m_s^* необходимо понимать абсолютные значения энергии эффективной циклотронной и продольной масс дырок.

Если при квантовании рассматривать энергетическую зону в целом, то необходимо учесть следующее обстоятельство. Квази-частичные состояния вблизи дна зоны имеют положительную эффективную массу и называются электронами, тогда как состояния вблизи ее потолка имеют отрицательную эффективную массу и называются дырками.

При удалении от дна зоны эффективная масса электронов возрастает и стремится к $+\infty$ в середине зоны. При удалении от потолка зоны вниз эффективная масса дырок также возрастает по абсолютной величине и стремится к $-\infty$ в середине зоны. Переход от минимума энергии на дне зоны, окруженного замкнутыми изоэнергетическими поверхностями электронного типа, к максимуму на ее потолке, окруженному замкнутыми изоэнергетическими поверхностями дырочного типа, осуществляется через открытые изоэнергетические поверхности (соответствующие энергиям вблизи середины зоны).

При подходе к открытым траекториям циклотронные частоты движения электронов и дырок в магнитном поле стремятся к нулю: периоды обращения по орбите увеличиваются до бесконечности, движение перестает быть финитным и квантование энергии нарушается. Следовательно, невозможно проквантовать энергию всех состояний в зоне, начиная от ее дна до потолка. По мере удаления от дна (или потолка) уровни Ландау неограниченно сгущаются ($\hbar\omega_c = \frac{|e|\hbar H}{m^*c} \rightarrow 0$ при любом H) и энергетический спектр носителей тока, соответствующий движению в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, переходит в квазинепрерывный.

Таким образом, поведение квазичастиц на электронных и дырочных изоэнергетических поверхностях в магнитном поле остается различным. Это означает, что введение электронов и дырок связано с устойчивым физическим признаком, который не изменяется при квантовании энергии в магнитном поле.

§ 2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В p-ПРОСТРАНСТВЕ В ПРИСУТСТВИИ КВАНТУЮЩЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ

Рассмотрим, как изменяется распределение электронных состояний в p-пространстве под действием квантующего магнитного поля в квазиклассическом приближении. Для простоты проанализируем случай однозонного металла со сферической поверхностью Ферми и будем пренебрегать спинным расщеплением. При $H=0$ разрешенные состояния распределены равномерно внутри сферы Ферми и соответствуют элементарным объемам $(2\pi\hbar)^3$. Для наглядности их можно изобразить точками, отстоящими друг от друга на расстояниях $2\pi\hbar$ по осям p_x , p_y и p_z .

На рис. 160 показано сечение сферы Ферми плоскостью $p_z=0$. Разрешенные состояния в этой плоскости заполняют круг максимального радиуса $p_F = \sqrt{2me_F}$. В любом сечении $p_z = \text{const}$ занятые состояния заполняют также круг, радиус которого равен $\sqrt{p_F^2 - p_z^2}$. По мере увеличения p_z от нуля до p_F этот радиус уменьшается и обращается в нуль в опорных точках: $p_z = \pm p_F$.

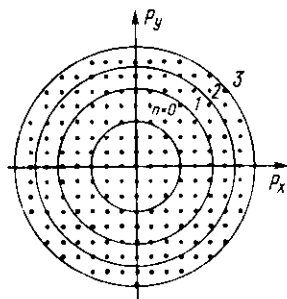


Рис. 160

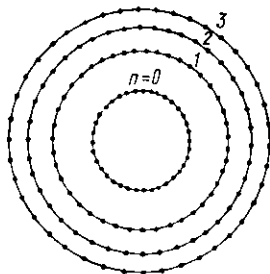


Рис. 161

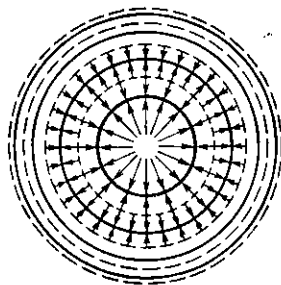


Рис. 162

Равномерное заполнение сферы Ферми точками, изображающими разрешенные состояния, соответствует квазинепрерывному энергетическому спектру $\varepsilon = \varepsilon(p_x, p_y, p_z)$, где p_x, p_y, p_z пробегает квазинепрерывные наборы значений от 0 до p_F .

Включение магнитного поля не меняет полное число электронов в металле*). Однако магнитное поле может изменить распределение электронов по энергиям и, как следствие этого, перераспределить электроны между зонами. В выбранном нами примере однозонного металла только одна 1-я зона является частично заполненной, тогда как все остальные зоны пусты. Заполненные состояния расположены около минимума энергии в 1-й зоне (около дна зоны). В этом случае число электронов в 1-й зоне, которое совпадает с полным числом электронов в металле, не меняется при включении магнитного поля.

Направим магнитное поле вдоль оси z . При этом разрешенными значениями энергии ε_n , относящейся к движению в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, становятся дискретные уровни $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$. Эти уровни энергии определяют дискретные разрешенные орбиты электронов в плоскостях $p_z = \text{const}$ p-прост-

*) Это справедливо только для металла с нечетной валентностью z . Для компенсированных металлов с четной валентностью равные концентрации электронов и дырок $n_e = n_h$ связаны с перекрытием зон, которое может изменяться в магнитном поле (см. ниже гл. 7).

рапства. Для того чтобы найти радиус p_n орбиты, запишем классическое выражение для $\epsilon_{\perp}$ в виде

$$\epsilon_{\perp}^{\text{кл}} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} = \frac{p_n^2}{2m}$$

и сопоставим его по принципу соответствия с квантовым выражением $\epsilon_{\perp}^{\text{кв}} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$. При этом получим

$$p_n = \sqrt{2m\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)} = \frac{|e|\hbar}{c} H r_{Hn}, \quad (6.15)$$

где $n=0, 1, 2, \dots$ (см. (6.6)).

Все состояния, которые при $H=0$ были расположены в плоскости $p_z = \text{const}$ между орбитами с радиусами p_n ($n=0, 1, 2, \dots$), при включении магнитного поля оказываются запрещенными, т. е. все разрешенные состояния в плоскости $p_z = \text{const}$ стягиваются на квантованные орбиты (рис. 161). Эти орбиты разделяют всю плоскость (p_x, p_y) на concentric «пояски», расположенные между соседними окружностями с радиусами p_n и p_{n+1} . Легко заметить, что площади ΔS всех таких «поясков» $\pi(p_{n+1}^2 - p_n^2)$ совпадают между собой и равны величине $2\pi m\hbar\omega_c$. Площадь круга внутри центральной орбиты с радиусом p_0 вдвое меньше этой величины: $\pi p_0^2 = \pi m\hbar\omega_c$. Проведем из начала координат на плоскости (p_x, p_y) вспомогательные окружности с радиусами $p'_n = \sqrt{2m\hbar\omega_c(n+1)}$, где $n=0, 1, 2, \dots$. На рис. 162 квантованные орбиты показаны в виде сплошных окружностей, а вспомогательные окружности — в виде пунктирных. Вспомогательная окружность с радиусом $p'_0 = \sqrt{2m\hbar\omega_c}$ расположена между орбитами с радиусами p_0 и p_1 так, что она делит площадь «пояска» ΔS на две равные части $\pi m\hbar\omega_c$. Аналогично вспомогательная окружность с радиусом p'_n расположена между орбитами с радиусами p_n и p_{n+1} и также делит на две равные части площадь соответствующего «пояска». С помощью проведенного построения стягивание разрешенных состояний в плоскости (p_x, p_y) на квантовые орбиты (6.15), возникающее при включении магнитного поля, можно сопоставить со стягиванием уровней квазинепрерывного спектра в полосе шириной $\hbar\omega_c$ в дискретные энергетические уровни $\epsilon_{\perp}(n)$ на рис. 155.

По существу, рис. 155 и 162 являются различными иллюстрациями одного и того же физического явления: при включении магнитного поля H все состояния, которые ранее были расположены между вспомогательными окружностями с радиусами p'_n и p'_{n-1} , стягиваются на орбиту с радиусом p_n . При этом на орбиту с радиусом p_0 стягиваются все состояния, расположенные между орбитой и окружностью с радиусом p'_0 , а также состояния, расположенные внутри центрального круга с радиусом p_0 . Таким

образом, на каждой разрешенной орбите оказывается одно и то же число электронных состояний ΔN , которое с учетом двукратного вырождения по спину равно отношению удвоенной площади между соседними вспомогательными окружностями $2 \cdot 2\pi\hbar\omega_c$ к элементарной площадке $(2\pi\hbar)^2/L_x L_y$:

$$\Delta N = \frac{4\pi m\hbar\omega_c}{(2\pi\hbar)^2} L_x L_y = \frac{L_x L_y}{\pi\hbar c} |e| H. \quad (6.16)$$

Это число, очевидно, совпадает со степенью вырождения уровня Ландау (6.5). Отсюда можно заключить, что разрешенные орбиты на плоскости (p_x, p_y) вырождены в той же степени, как и дискретные уровни энергии $\epsilon_{\perp}(n)$ движения электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю.

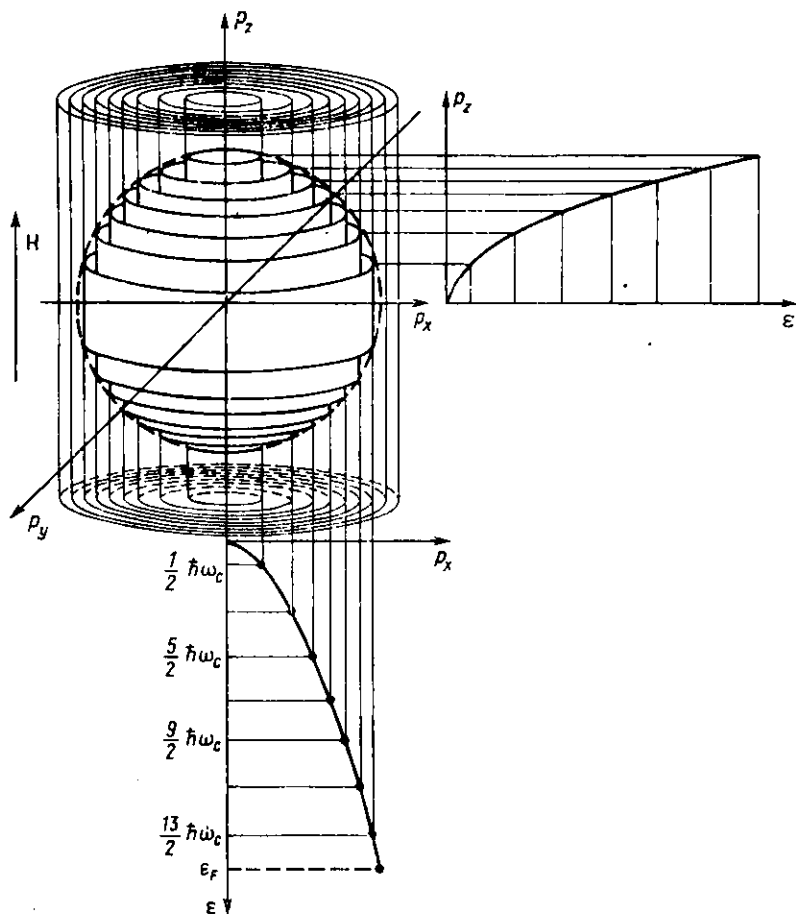


Рис. 163

Поскольку радиус квантованной орбиты p_n (6.15) не зависит от p_z , орбиты электронов во всех плоскостях $p_z = \text{const}$ полностью совпадают между собой. Это означает, что разрешенные при $H=0$ состояния в пространстве импульсов в магнитном поле стягиваются на поверхности коаксиальных круговых цилиндров, параллельных оси p_z , которые получили название цилиндров Ландау (рис. 163). Общее число состояний, заполненных электронами на каждом цилиндре, зависит от его длины в пределах сферы Ферми. С ростом радиуса p_n цилиндра его длина убывает. Количество цилиндров внутри сферы Ферми ограничено числом n_{max} , которое находится из следующего неравенства: $p_{n_{\text{max}}+1} > p_F > p_{n_{\text{max}}}$, откуда, учитывая (5.15), получим

$$2m\hbar\omega_c \left(n_{\text{max}} + 1 + \frac{1}{2} \right) > 2me_F > 2m\hbar\omega_c \left(n_{\text{max}} + \frac{1}{2} \right), \quad (6.17)$$

или

$$n_{\text{max}} + 1 > \frac{\varepsilon_F - \frac{\hbar\omega_c}{2}}{\hbar\omega_c} > n_{\text{max}}.$$

Из (6.17) следует, что число цилиндров n_{max} убывает с ростом магнитного поля.

На рис. 163 внизу приведен график зависимости энергии состояний на каждом цилиндре в плоскости $p_z=0$ от радиуса цилиндра. Эти энергии представляют собой дискретный ряд $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$. Справа показана зависимость от p_z энергии состояний на каждом цилиндре, отсчитанной относительно значения энергии при $p_z=0$. Очевидно, степень вырождения состояний на цилиндре Ландау совпадает со степенью вырождения квантованных орбит. Длина n -го цилиндра Ландау в пределах сферы Ферми определяется из соотношения

$$\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_{zn}^2}{2m} = \frac{p_n^2}{2m} + \frac{p_{zn}^2}{2m} = \varepsilon_F,$$

откуда заполненная электронами часть цилиндра равна $2\sqrt{p_F^2 - p_n^2}$.

Определим полное число занятых состояний N_n на цилиндре с номером n . Число различных по p_z состояний на цилиндре составляет $2\sqrt{p_F^2 - p_n^2} \cdot L_x/2\pi\hbar$. Очевидно, N_n равно произведению этой величины на число состояний $\Delta N = L_x L_y \frac{4\pi m \hbar \omega_c}{(2\pi\hbar)^2}$, стянувших-ся на цилиндр в плоскости $p_z = \text{const}$. Таким образом,

$$\begin{aligned} N_n &= \frac{4\pi m \hbar \omega_c}{(2\pi\hbar)^2} 2 \frac{\sqrt{p_F^2 - p_n^2}}{(2\pi\hbar)} L_x L_y L_z = \\ &= \frac{8\pi m \hbar \omega_c}{(2\pi\hbar)^3} V \cdot \sqrt{2m \left[\varepsilon_F - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]}, \end{aligned} \quad (6.18)$$

где $V = L_x L_y L_z$ — объем кристалла.

Как следует из (6.18), число электронов на цилиндре Ландау с номером n обращается в нуль при $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) = \epsilon_F$. В этот момент радиус цилиндра ρ_n становится равным ρ_F , а длина цилиндра в пределах сферы Ферми оказывается равной нулю. Таким образом, выход цилиндра за пределы сферы Ферми сопровождается освобождением его от электронов, которые ранее находились на нем. Эти электроны перераспределяются на цилиндры меньшего радиуса, расположенные внутри сферы Ферми. По мере того как все большее число цилиндров освобождается от электронов, растет степень вырождения цилиндров, оставшихся внутри сферы Ферми. При некотором значении магнитного поля все электроны будут сконцентрированы на последнем цилиндре с номером $n=0$.

Остановимся теперь на том, как меняется распределение электронных состояний в p -пространстве при квантовании энергии в магнитном поле в случае произвольного закона дисперсии.

В квазиклассическом приближении при произвольном законе дисперсии циклотронная частота движения электрона в плоскости, перпендикулярной магнитному полю $\omega_c = \frac{|e|\hbar H}{m_c^* c}$, где $m_c^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \epsilon}$ — эффективная циклотронная масса частицы. Расстояние между эквидистантными энергетическими уровнями

$$\delta\epsilon = \hbar |\omega_c| = \frac{\hbar |e| H}{c \left| \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \epsilon} \right|},$$

откуда

$$\left| \frac{\partial S}{\partial \epsilon} \right| \delta\epsilon = \delta S = \frac{2\pi |e| \hbar H}{c}.$$

Интегрируя, находим

$$S_n = \frac{2\pi |e| \hbar H}{c} (n + \gamma), \quad (6.19)$$

где γ — неизвестная априори фазовая добавка, равная для квадратичного закона дисперсии $1/2$. Выражение (6.19) означает, что при фиксированном магнитном поле для любого сечения поверхности Ферми плоскостью $p_z = \text{const}$ разрешенными являются только орбиты с дискретным значением площади S_n , зависящим от квантового номера n .

Электронные состояния, расположенные равномерно в плоскости $p_z = \text{const}$ внутри поверхности Ферми, при включении магнитного поля стягиваются на разрешенные квантовые орбиты, площади которых определяются выражением (6.19). Поскольку S_n не зависит от величины p_z , электронные состояния в объеме, ограничен-

ном поверхностью Ферми, конденсируются на трубки, площади сечения которых всеми плоскостями $p_z = \text{const}$ постоянны и равны S_n (трубки Ландау) (рис. 164).

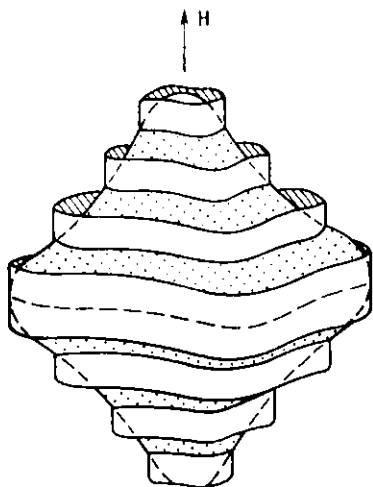


Рис. 164

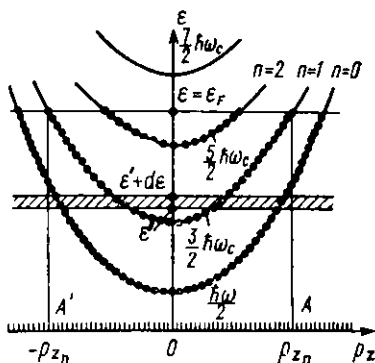


Рис. 165

Степень вырождения каждой трубки пропорциональна $\hbar\omega_c$. Эти трубки в случае сферической поверхности Ферми переходят в рассмотренные выше круговые цилиндры Ландау. При изотропном квадратичном законе дисперсии $\varepsilon = p^2/2m$ квантованная площадь орбиты S_n равна πp_n^2 . В этом случае общее выражение для квантования площадей (6.19) дает полученное выше соотношение (6.15), определяющее радиус p_n квантованной орбиты.

Форма цилиндрической трубки Ландау с номером n при произвольном законе дисперсии определяется формой сечений изоэнергетической поверхности плоскостью $p_z = \text{const}$, площадь которого задана величиной S_n (6.19). При увеличении магнитного поля площади разрешенных орбит и расстояния между ними увеличиваются. Вследствие этого трубки Ландау начинают последовательно освобождаться от электронов и выходить за пределы поверхности Ферми. Такая картина аналогична движению совокупности круговых цилиндров Ландау в случае изотропного квадратичного закона дисперсии.

Для того чтобы от картины, изображенной на рис. 170, перейти в координатное пространство, надо, как указывалось выше, повернуть систему трубок вокруг оси $p_z \parallel \mathbf{H}$ на $\pi/2$ и изменить масштаб в $\frac{c}{|e|H}$ раз. При этом площади орбит S_p в пространстве импульсов изменятся в $\left(\frac{c}{eH}\right)^2$ раз. Таким образом, в координат-

ном пространстве изменение площади орбиты при переходе от уровня n к $n+1$ равно $\frac{2\pi\hbar c}{|e|H}$. Магнитный поток, проходящий через кольцевой контур, заключенный между двумя соседними орбитами, оказывается равным

$$\Delta\Phi = \frac{2\pi\hbar c}{|e|H} \cdot H = \frac{2\pi\hbar c}{|e|} = \Phi_0. \quad (6.20)$$

Величина $\Phi_0 = 4,14 \cdot 10^{-7}$ Гс·см² называется квантом магнитного потока.

Заметим, что величина магнитного потока, проходящего через орбиту, соответствующую значению $n=0$, т. е. орбиту минимально возможного при данном H , радиуса r_0 при $\gamma=1/2$ составляет (см. (6.15))

$$\pi r_{H_0}^2 \cdot H = \pi \left(\frac{c}{eH} \right)^2 H p_0^2 = \frac{\pi\hbar c}{|e|} = \frac{\Phi_0}{2} = 2,07 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2.$$

Эта величина в два раза меньше Φ_0 .

§ 3. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Вернемся вновь к представлению энергетического спектра электронов в магнитном поле в виде совокупности парабол, сдвинутых одна относительно другой на величину. На каждой параболе состояния с различными значениями p_z расположены вдоль оси p_z на расстояниях $2\pi\hbar$ друг от друга (рис. 165). Точки на параболах при $\epsilon < \epsilon_F$ условно изображают занятые состояния.

Парабола с номером n пересекает уровень Ферми при некотором значении p_{zn} . Чем больше номер параболы n , тем меньше значение p_{zn} соответствует энергии, равной ϵ_F . Максимальное число $n_{\max}$ парабол, находящихся ниже уровня Ферми, определяется тем же двойным неравенством (6.17), которое определяет максимальное число цилиндров внутри сферы Ферми в p -пространстве, найденное в предыдущем параграфе. Кратность вырождения всех разрешенных состояний на каждой параболе совпадает с кратностью вырождения уровней Ландау и равна $L_x L_y |e|H/\pi\hbar c$. Длина цилиндра с номером n в пределах сферы Ферми совпадает с размером соответствующей параболы по оси p_z между двумя симметричными точками пересечения с уровнем Ферми (например, между точками A и A' на рис. 165). Следовательно, полное число состояний на n -й параболе, находящейся ниже уровня Ферми, совпадает с полным числом состояний N_n на n -м цилиндре в пределах сферы Ферми (см. выражение (6.18)). Это число состояний уменьшается по мере того, как с ростом магнитного поля парабола поднимается вверх, а заполненная ее часть между точками пересечения с уровнем Ферми укорачивается.

Энергия электрона на каждой параболе (при фиксированном значении квантового номера n) зависит только от одной компоненты импульса p_z подобно тому, как это имеет место в одномерной электронной системе. В связи с этим для описания плотности электронных состояний на параболе можно воспользоваться выражением (5.10). При этом необходимо учесть, что энергия электронов на параболе отсчитывается не от $\epsilon=0$, а от величины $\epsilon = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$, которая соответствует наинизшему состоянию с $p_z=0$ (т. е. дну параболы). Это значит, что в качестве аргумента в формуле (5.10) следует рассматривать разность $\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Кроме того, необходимо учесть, что в магнитном поле каждое состояние по p_z имеет кратность вырождения $L_x L_y |e| H / \pi \hbar c$.

Принимая во внимание сделанные замечания, формулу для плотности $v_n(\epsilon)$ состояний на n -й параболе Ландау для кристалла единичных размеров ($L_x=L_y=L_z=1$) можно записать в виде

$$v_n(\epsilon) = \frac{|e| H}{\pi \hbar c} \frac{m^{1/2}}{\sqrt{2} \pi \hbar} \left[\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2}. \quad (6.21)$$

Очевидно, чтобы получить полную плотность состояний $v_H(\epsilon)$ электронной системы в магнитном поле для данного значения энергии ϵ , достаточно просуммировать выражения для $v_n(\epsilon)$ по всем параболам, для которых аргумент $\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$ является положительной величиной. Например, для значения энергии $\epsilon = \epsilon'$ (рис. 165) вклад в полное число состояний $dN(\epsilon')$ в интервале энергий от ϵ' до $\epsilon' + d\epsilon$ вносят состояния из этого интервала, расположенные только на двух параболах с $n=0$ и $n=1$. Поэтому для получения полной плотности состояний $v_H(\epsilon')$ надо сложить только $v_0(\epsilon)$ и $v_1(\epsilon)$. Полная плотность состояний $v_H(\epsilon)$ в магнитном поле у электронной системы с квадратичным изотропным законом дисперсии без учета спинowego расщепления уровней Ландау может быть записана в виде

$$v_H(\epsilon) = \frac{m^{3/2} \hbar \omega_c}{\sqrt{2} \pi^3 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n=n_\epsilon} \left[\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2}. \quad (6.22)$$

Максимальное число n парабол для уровня энергии ϵ , которое определяет верхнее значение индекса суммирования в (6.22), находится из двойного неравенства:

$$n_\epsilon + 1 > \frac{\epsilon - \frac{\hbar\omega_c}{2}}{\hbar\omega_c} > n_\epsilon. \quad (6.23)$$

Плотность состояний $v_n(\epsilon)$ на n -й параболе имеет бесконечную особенность при $p_z=0$ или, иначе, при $\epsilon = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$. Функ-

ции $\nu_n(\epsilon)$ для $n=0, 1, 2, \dots$ показаны на рис. 166. Полная плотность состояний $\nu_H(\epsilon)$ показана на рис. 167. На этом же рисунке пунктиром изображена зависимость зонной плотности состояний $\nu^{III}(\epsilon)$ от энергии при $H=0$ (см. рис. 52) *).

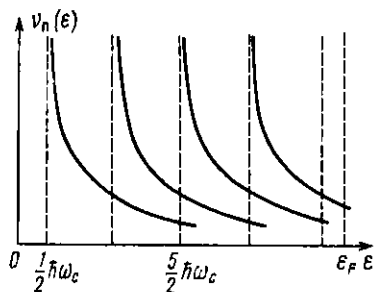


Рис. 166

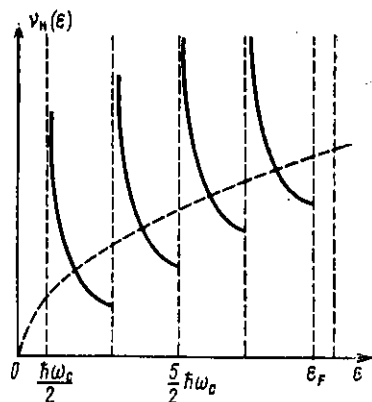


Рис. 167

Поскольку общее число электронов в магнитном поле не меняется, площади под кривыми $\nu_H(\epsilon)$ и $\nu^{III}(\epsilon)$ в пределах от 0 до ϵ_F должны быть равны между собой. При уменьшении магнитного поля H плотность парабол Ландау увеличивается. Очевидно, в пределе при $H \rightarrow 0$ мы должны от дискретных парабол Ландау вновь перейти к квазинепрерывному спектру трехмерной системы $\epsilon = \epsilon(p_x, p_y, p_z)$. Плотность состояний такой системы описывается формулой (4.2).

Покажем, что предельный переход при $H \rightarrow 0$ в выражении для плотности состояний $\nu_H(\epsilon)$ (5.22) действительно дает (4.2) для $\nu^{III}(\epsilon)$. При малых H уровни Ландау становятся весьма близкими, при этом в формуле (6.22) от суммирования по n можно перейти к интегрированию по непрерывной переменной u :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{n_e} \left[\epsilon - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{-1/2} &\rightarrow \int_0^{n_e} \left[\epsilon - \left(u + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} du = \\ &= -\frac{2}{\hbar\omega_c} \left[\epsilon - \hbar\omega_c \left(u + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2} \Big|_{u=0}^{u=n_e}. \end{aligned}$$

При значении $u=n_e$ разность $\epsilon - \hbar\omega_c \left(u + \frac{1}{2} \right)$ не превышает величины $\hbar\omega_c$. Запишем эту разность в виде $\alpha\hbar\omega_c$, где $0 < \alpha < 1$. Пре-

*) При анализе плотности состояний в магнитном поле мы для простоты не рассматриваем влияние перенормировки эффективной массы.

дельный переход от $v_H(\varepsilon)$ при $H \rightarrow 0$ выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \lim_{H \rightarrow 0} v_H(\varepsilon) &= \lim_{H \rightarrow 0} \frac{2m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \left\{ \left(\varepsilon - \frac{\hbar\omega_c}{2} \right)^{1/2} - (\alpha\hbar\omega_c)^{1/2} \right\} = \\ &= \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\pi^2\hbar^3} \varepsilon^{1/2} = \frac{8\pi\sqrt{2}}{(2\pi\hbar)^3} m^{3/2} \varepsilon^{1/2}. \end{aligned}$$

Полученное выражение совпадает с формулой (5.2) для $v^{III}(\varepsilon)$ при $V=1$.

Рассмотрим, как меняется плотность состояний на уровне Ферми при увеличении магнитного поля. Из рис. 167 следует, что бесконечные особенности плотности состояний $v_H(\varepsilon)$ соответствуют значениям энергии, равным $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right)$ при $n=0, 1, 2, \dots$

При возрастании магнитного поля расстояния $\hbar\omega_c$ между особенностями увеличиваются, и бесконечные максимумы («пики») на кривой $v_H(\varepsilon)$ последовательно проходят через уровень Ферми. Каждый раз, когда дно очередной параболы Ландау совпадает с уровнем Ферми, на нем возникает бесконечная особенность плотности состояний, которая в свою очередь вызывает особенности всех термодинамических и кинетических характеристик электронной системы, зависящих от числа электронов на уровне Ферми.

Периодическое повторение этих особенностей при увеличении H является физической причиной осциллирующей зависимости от магнитного поля таких величин, как электропроводность, магнитная восприимчивость, электронная часть теплоемкости и т. д. В реальных случаях, благодаря тому, что время жизни τ квази-частиц имеет конечное значение, каждый уровень Ландау размыт на величину $\Delta\varepsilon$, которую можно оценить из соотношения неопределенностей Гейзенберга: $\Delta\varepsilon \cdot \tau \gtrsim \hbar$. Кроме того, при конечной температуре T граница ферми-распределения также размыта на величину $\sim kT$ (рис. 168). Вследствие этих причин особенности плотности состояний на уровне Ферми становятся более или менее резко выраженными пиками.

Для наблюдения осцилляционной зависимости физических величин в магнитном поле необходимо, чтобы уширение уровней Ландау $\sim \hbar/\tau$ и размытие уровня Ферми $\sim kT$ были существенно меньше энергетического расстояния $\hbar\omega_c$ между особенностями. Для этого должны быть выполнены неравенства

$$\hbar\omega_c \gg kT, \quad \hbar\omega_c \gg \hbar/\tau \quad \text{или} \quad \omega_c \tau \gg 1. \quad (6.24)$$

Вследствие того что общее количество электронов в металле есть постоянная величина и не зависит от магнитного поля, осцилляции плотности состояний на уровне Ферми вызывают осцилляции положения уровня Ферми. Наиболее просто это явление можно пояснить на примере однозонного металла, в котором электроны заполняют часть первой зоны вблизи минимума энергии, с

квадратичным изотропным законом дисперсии. Определим концентрацию электронов, интегрируя по энергии выражение (6.22) для плотности $\nu_H(\epsilon)$ состояний. Обратим внимание на то, что интегрирование каждого члена в сумме (6.22) необходимо произ-

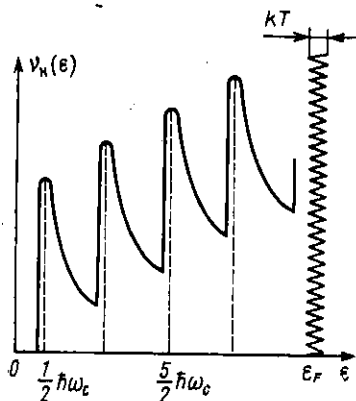


Рис. 168

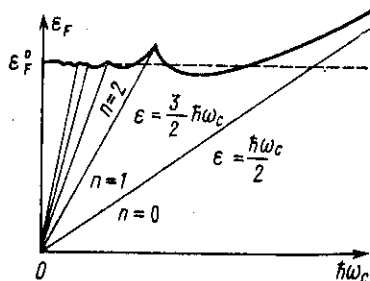


Рис. 169

водить от значения энергии, соответствующей дну параболы Ландау

$$\epsilon = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right), \text{ до } \epsilon = \epsilon_F.$$

(В результате интегрирования получим

$$n = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \hbar\omega_c}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n=n_{\max}} \left[\epsilon_F(H) - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{1/2}, \quad (6.25)$$

где $n_{\max}$ определяется двойным неравенством (6.17).)

Нетрудно проверить, что при $H \rightarrow 0$ выражение (6.25) переходит в формулу для концентрации электронов в однозонном металле с квадратичным изотропным законом дисперсии:

$$n = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2 \hbar^3} m^{3/2} (\epsilon_F^0)^{3/2}, \quad (6.26)$$

где через ϵ_F^0 обозначена энергия Ферми при $H=0$. Выражение (6.25) определяет зависимость значения ϵ_F от магнитного поля. Можно показать, что при $\hbar\omega_c \gg \epsilon_F^0$ относительное изменение энер-

гии Ферми $\frac{\epsilon_F(H) - \epsilon_F^0}{\epsilon_F^0}$ в магнитном поле является эффектом, пропорциональным $\hbar\omega_c/\epsilon_F^0$. Поэтому в полях H , для которых $\hbar\omega_c \ll \epsilon_F^0$, энергию Ферми можно считать практически постоянной ве-

личиной, равной ϵ_F^0 . Однако при $\hbar\omega_c \sim \epsilon_F^0$ периодическое изменение энергии Ферми в магнитном поле становится весьма существенным эффектом, который нельзя не учитывать при расчетах величин, зависящих от ϵ_F . При возрастании магнитного поля количество уровней Ландау, расположенных ниже уровня Ферми, уменьшается. Уровни Ландау последовательно пересекают уровень Ферми и освобождаются от электронов. При выходе очередного уровня Ландау находящиеся на нем электроны переходят на нижние уровни. Последним уровнем, который в принципе может освободиться от электронов, является уровень с $n=1$. После его выхода под уровнем Ферми остается только один уровень Ландау с $n=0$. На него конденсируются все электроны в металле.

Область магнитных полей, при которых электроны конденсируются на последний уровень, носит название ультраквантовой. В этой области квазиклассическое приближение перестает быть применимым.

Обозначим через H_n значение магнитного поля, при котором n -й уровень Ландау пересекает уровень Ферми, и пусть ω_n обозначает циклотронную частоту при $H=H_n$. Проведем вычисление ϵ_F при выходе нескольких первых уровней, т. е. при $H=H_1, H_2$ и т. д.

При $H=H_1$ дно параболы с $n=1$ совпадает с уровнем Ферми. Следовательно, при этом значении поля $\epsilon_F(H_1) = \frac{3}{2} \hbar\omega_1$ (см. рис. 165), а в формуле для концентрации (6.25) остается только одно слагаемое:

$$n(H_1) = \frac{\sqrt{2} m^{3/2} \hbar\omega_1}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\epsilon_F(H_1) - \frac{1}{2} \hbar\omega_1}.$$

Заменяя $\hbar\omega_1$ на $\frac{2}{3} \epsilon_F(H_1)$, получим

$$n(H_1) = \frac{4m^{3/2} [\epsilon_F(H_1)]^{3/2}}{3\sqrt{3} \pi^2 \hbar^3}. \quad (6.27)$$

Поскольку концентрация электронов в однозонном металле не зависит от магнитного поля, то выражения (6.26) и (6.27) определяют одну и ту же величину. Сравнивая их между собой, найдем, что

$$\epsilon_F(H_1) = \left(\frac{3}{2}\right)^{1/2} \epsilon_F^0 \simeq 1,146 \epsilon_F^0.$$

Аналогичным способом можно показать, что

$$\epsilon_F(H_2) = \frac{\frac{5}{2} \left(\frac{2}{3}\right)^{2/3}}{(1 + \sqrt{1 + \frac{2}{3}})^{2/3}} \epsilon_F^0 \simeq 1,058 \epsilon_F^0.$$

Общее выражение для $\varepsilon_F(H_n)$ имеет вид

$$\varepsilon_F(H_n) = \left(\frac{2}{3}\right)^{2/3} \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)}{[\sqrt{1} + \sqrt{2} + \dots + \sqrt{n}]^{2/3}} \varepsilon_F^0. \quad (6.28)$$

Посмотрим теперь, как будет меняться энергия Ферми в ультраквантовой области магнитных полей при $H > H_1$. В этой области полей в сумме (6.25) остается только одно слагаемое и

$$n = \frac{\sqrt{2} \hbar \omega_c \cdot m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{\varepsilon_F(H) - \frac{\hbar \omega_c}{2}}. \quad (6.29)$$

Выражение (6.29) позволяет найти явный вид зависимости $\varepsilon_F^{\text{укп}}$ от H в ультраквантовой области полей:

$$\varepsilon_F^{\text{укп}} = \frac{\hbar \omega_c}{2} + \frac{\pi^4 \hbar^3 n^2}{2m^3} + \left(\frac{1}{\hbar \omega_c}\right)^2. \quad (6.30)$$

Формула (6.30) показывает, что при $H \rightarrow \infty$ $\varepsilon_F^{\text{укп}}$ стремится к асимптотической зависимости $\varepsilon_F^{\text{укп}} = \frac{\hbar \omega_c}{2}$.

Зависимость энергии Ферми от магнитного поля во всем интервале полей от $H=0$ до $H > H_1$ показана на рис. 169. В области малых полей $H \ll H_1$ ε_F практически не зависит от H и равно ε_F^0 . В полях $H_{10} \div H_1$ наблюдаются осцилляции ε_F , при которых, как показывает проведенный выше расчет, максимальное отклонение ε_F от ε_F^0 , наблюдающееся при $H=H_1$, не превышает 14,6%.

Качественно осцилляции уровня Ферми можно объяснить следующим образом. Все заполненные энергетические состояния расположены ниже уровня Ферми и распределены по энергии в соответствии с функцией плотности состояний (рис. 168). При заданной концентрации электронов, положение уровня Ферми определяется емкостью «резервуара», заполненного электронами. При увеличении магнитного поля расстояние между пиками плотности состояний увеличивается и пики периодически пересекают уровень Ферми. Этот процесс сопровождается перераспределением электронов между различными энергетическими состояниями, в результате чего емкость «резервуара» периодически изменяется. Когда емкость увеличивается — уровень Ферми понижается. Наоборот, при уменьшении емкости уровень Ферми повышается.

В ультраквантовой области магнитных полей ниже уровня Ферми остается единственная парабола Ландау с номером $n=0$, на которую при $H=H_1$ переходят все электроны. На этой параболе электроны остаются до сколь угодно больших магнитных полей. При этом ширина области заполненных состояний между уровнем Ферми и дном параболы, равная $\varepsilon_F^{\text{укп}}(H) - \frac{\hbar \omega_c}{2}$, убывает как $1/H^2$. Поскольку ширина этой области, как легко видеть на рис. 165, равна также $p_{Fz}^2/2m$ (здесь p_{Fz} — граничное значение

z-компоненты импульса электронов), используя выражение (6.30), получаем

$$\frac{p_{Fz}^2}{2m} = \frac{\pi^4 \hbar^6 n^2}{2m^3} \left(\frac{1}{\hbar \omega_c} \right)^2. \quad (6.31)$$

Это соотношение определяет величину волнового вектора k_{Fz} электрона на уровне Ферми и длину волны λ_{Bz} де Бройля электрона в направлении магнитного поля:

$$k_{Fz} = \frac{p_{Fz}}{\hbar} = \frac{\pi^2}{2} l_H^2 \cdot n, \quad (6.32)$$

$$\lambda_{Bz} = \frac{2\pi}{k_{Fz}} = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{1}{l_H^2 n}. \quad (6.33)$$

$l_H = \sqrt{\frac{2c\hbar}{|e|H}}$ — параметр, который получил название магнитной длины.

Магнитная длина определяет масштаб волновой функции электрона в ультраквантовой области магнитных полей. В этой области длина волны де Бройля λ_{Bz} неограниченно возрастает пропорционально H .

Вернемся вновь к рассмотрению области магнитных полей $H \ll \ll H_1$, в которой можно пренебречь изменением энергии Ферми в магнитном поле. Будем считать, что $\epsilon_F(H) = \epsilon_F^0$, и определим частоту, с которой пики плотности состояний проходят через уровень Ферми.

Очередной максимум плотности состояний на уровне Ферми, соответствующий выходу параболы с номером n , имеет место при таком значении магнитного поля H_n , для которого

$$\hbar \frac{|e|H_n}{mc} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \epsilon_F(H_n), \quad (6.34)$$

отсюда

$$\frac{1}{H_n} = \frac{|e|\hbar}{mc\epsilon_F(H_n)} \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.35)$$

Аналогично для особенности, соответствующей уровню с номером $n+1$, имеем

$$\frac{1}{H_{n+1}} = \frac{|e|\hbar}{mc\epsilon_F(H_{n+1})} \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right). \quad (6.36)$$

Если принять, что энергия Ферми $\epsilon_F(H)$ в первом приближении не зависит от магнитного поля: $\epsilon_F(H_n) = \epsilon_F(H_{n+1}) = \epsilon_F^0$, то, вычитая одно из другого выражения (6.36) и (6.35), получим

$$\frac{1}{H_{n+1}} - \frac{1}{H_n} = \frac{|e|\hbar}{mc\epsilon_F^0}. \quad (6.37)$$

Формула (6.37) показывает, что в принятом приближении $\varepsilon_F(H) = \varepsilon_F^0$ интервал между последовательными особенностями плотности состояний на уровне Ферми в обратном магнитном поле не зависит от номера и является постоянной величиной. Это означает, что особенности возникают периодически в обратном магнитном поле. Величина $\frac{1}{H_{n+1}} - \frac{1}{H_n}$ называется периодом осцилляций в обратном поле и обозначается через $\Delta\left(\frac{1}{H}\right)$. Период осцилляций равен

$$\Delta\left(\frac{1}{H}\right) = \frac{|e|\hbar}{m\varepsilon_F^0}. \quad (6.38)$$

По его величине можно найти произведение $m\varepsilon_F^0$, которое определяет площадь экстремального сечения S_{extr} сферы Ферми:

$$S_{\text{extr}} = \pi p_F^2 = 2\pi m\varepsilon_F^0 = \frac{2\pi|e|\hbar}{c} \cdot \frac{1}{\Delta\left(\frac{1}{H}\right)}. \quad (6.39)$$

Формула (6.39), полученная в частном случае для сферы Ферми, справедлива для любого закона дисперсии, если под S_{extr} понимать площадь экстремального сечения поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной направлению магнитного поля. В общем виде она называется формулой Лифшица — Онзагера и следует из формулы для квантования площадей S_n орбит в магнитном поле (6.19).

Действительно, особенность плотности состояний на уровне Ферми наблюдается тогда, когда очередная трубка выходит за пределы поверхности Ферми, а не сечение плоскостью $p_z = \text{const}$ достигает экстремального сечения S_{extr} . Обозначая через H_n величину магнитного поля в момент особенности, формулу (6.19) можно записать в виде

$$S_{\text{extr}} = \frac{2\pi\hbar|e|H_n}{c} (n + \gamma). \quad (6.40)$$

Для того чтобы перейти от формулы (6.40) к (6.39), необходимо предположить, что экстремальное сечение поверхности Ферми S_{extr} не зависит от номера особенности. Это эквивалентно предположению о постоянстве уровня Ферми, которое справедливо только при $\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F^0$. Таким образом, область применимости формулы (6.39) и при произвольном законе дисперсии ограничена также значениями полей $H \ll H_1$ или значениями больших квантовых номеров $n \gg 1$. При уменьшении номера n интервал $\frac{1}{H_{n+1}} - \frac{1}{H_n}$ перестает быть постоянной величиной, а положения самих особенностей сдвигаются в сторону больших полей по отно-

шению к значениям $H=H_n$, вычисленным при $\varepsilon_F(H)=\varepsilon_F^0$. Действительно, согласно (6.34)

$$H_n = \frac{mc}{|e|\hbar} \frac{1}{\left(n + \frac{1}{2}\right)} \varepsilon_F(H_n),$$

где $\varepsilon_F(H_n)$ связано с ε_F^0 и n выражением (6.25). При всех значениях $H=H_n$, $\varepsilon_F(H_n) > \varepsilon_F^0$.

Нетрудно вычислить положение особенностей $1/H_n$ в обратном магнитном поле для первых номеров уровней Ландау: $n=1, 2, 3, 4$. В единицах $|e|\hbar/mc\varepsilon_F^0$ значения $1/H_n$ равны

$$\frac{1}{H_n} = \frac{|e|\hbar}{mc\varepsilon_F^0} \left(n + \frac{1}{2}\right) \beta_n. \quad (6.41)$$

Фактор β_n , учитывающий осцилляции уровня Ферми, составляет 0,872; 0,945; 0,966; 0,977 для $n=1, 2, 3, 4$ соответственно.

Таким образом, положение первой особенности $1/H_1$ в обратном магнитном поле сдвинуто на 13% в сторону меньших значений обратных магнитных полей $1/H$ по сравнению с величиной $1/H_1$, вычисленной для $\varepsilon_F(H_1)=\varepsilon_F^0$. Интервал обратных полей $1/H_2-1/H_1$ между двумя первыми особенностями приблизительно в 1,05 раза превосходит величину $\Delta\left(\frac{1}{H}\right)$ в выражении (6.38).

Получим теперь выражение для плотности состояний электронов в металле с квадратичным законом дисперсии при учете спинового расщепления уровней Ландау. В этом случае каждая парабола на рис. 165 расщепляется на две, которые смещены относительно нее вверх и вниз на величину $\frac{1}{2} g\mu_B H$. Плотность состояний на вновь полученных параболах с учетом степени вырождения каждого состояния в магнитном поле по-прежнему можно описать формулой (4.10) для одномерной электронной системы. По аналогии с выражением (6.21) плотность состояний $\nu_{n,s}(\varepsilon)$ на параболе, соответствующей квантовым числам n и s , может быть записана в виде

$$\nu_{n,s}(\varepsilon) = \frac{2\pi m\hbar\omega_c}{(2\pi\hbar)^2} \cdot \frac{m^{1/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar} \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c - \frac{1}{2} s g\mu_B H \right]^{-1/2}. \quad (6.42)$$

Рассмотрим структуру выражения (6.12) для энергии электрона в магнитном поле с учетом спинового расщепления. Первый член в этом выражении описывает дискретные уровни энергии орбитального движения и соответствует квантованию энергии квазиклассического движения электрона по проекции его орбиты на плоскость, перпендикулярную магнитному полю H . Для описания параметров квазиклассической орбиты может быть использован принцип соответствия, согласно которому разрешенными орбита-

ми являются окружности с радиусами p_n , определяемыми выражением (6.15). Без учета спинного расщепления каждое состояние на орбите с радиусом p_n в плоскости $p_z = \text{const}$ имеет энергию $\hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}$ для обеих ориентаций спина. Совокупности всех состояний с данным значением n соответствует цилиндр Ландау с радиусом p_n .

Учет спинного расщепления уровней приводит к тому, что энергия каждого состояния с фиксированными n и p_z увеличивается на $\frac{1}{2} g\mu_B H$ для одной ориентации спина и уменьшается на ту же величину для другой. Энергетический сдвиг на $\frac{1}{2} g\mu_B H$, связанный с собственным магнитным моментом электрона, не имеет классического аналога и, следовательно, не может быть интерпретирован с помощью принципа соответствия на квазиклассическом языке. Однако введенный ранее наглядный образ в виде цилиндра Ландау можно сохранить и при учете спинного расщепления. Для этой цели введем новое значение энергии $\Omega_s = \varepsilon - s \frac{1}{2} g\mu_B H$ и с его помощью запишем выражение (6.12) для энергии электрона в магнитном поле в виде, совпадающем с выражением (6.11):

$$\Omega_s = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (6.43)$$

На основании принципа соответствия по-прежнему будем считать, что при включении магнитного поля разрешенные состояния в p -пространстве стягиваются на дискретные цилиндры Ландау с радиусами p_n , определенными формулой (6.15). Число состояний с данной проекцией спина, которые конденсируются на цилиндр в плоскости $p_z = \text{const}$, определяется площадью между соседними орбитами и равно $\frac{2\pi\hbar\omega_c m}{(2\pi\hbar)^2}$. Эта величина не зависит от p_z и характеризует степень вырождения состояний на цилиндре. При этом для каждого значения квантового числа n состояниям как с той, так и с другой ориентацией спина соответствует один и тот же цилиндр Ландау с радиусом p_n и одно и то же значение энергии Ω_s при данном значении p_z . Такой цилиндр Ландау абсолютно идентичен введенному ранее цилиндру Ландау без учета спинного расщепления. Вся специфика, связанная со спином электрона, теперь заключена в отличии энергии Ω_s от истинного значения энергии электрона в квантовом состоянии с данными n и p_z . Поскольку истинные значения энергии электронов отличаются от Ω_s на величину $\frac{1}{2} s g\mu_B H$, состояния электронов, расположенных на геометрически идентичных цилиндрах Ландау, соот-

ветствующие квантовым числам $s=+1$, отличаются между собой на величину энергии спинового расщепления $g\mu_B H$. Это означает, что каждому значению спиновой переменной s может быть сопоставлена своя система цилиндров с совпадающими при $s=+1$ и $s=-1$ радиусами ρ_n . Различие в энергии электронных состояний для $s=+1$ и $s=-1$ приводит к различию в длине области заполненных состояний на цилиндрах с одним и тем же радиусом ρ_n , но принадлежащим разным системам. Так, для системы, соответствующей $s=+1$, граничная энергия $\Omega_{F_{s=+1}} = \epsilon_F - \frac{1}{2} g\mu_B H$, тогда как для системы, соответствующей $s=-1$, она равна $\Omega_{F_{s=-1}} = \epsilon_F + \frac{1}{2} g\mu_B H$. Отсюда следует, что заполненные состояния на цилиндрах первой системы с $s=+1$ заключены внутри сферы меньшего радиуса

$$\rho_{F_{s=+1}} = \sqrt{2m\Omega_{F_{s=+1}}} = \sqrt{2m\left(\epsilon_F - \frac{1}{2} g\mu_B H\right)},$$

в результате чего цилиндры этой системы имеют меньшую длину по p_z . Соответствующий радиус граничной сферы для второй системы цилиндров с $s=-1$ равен

$$\rho_{F_{s=-1}} = \sqrt{2m\Omega_{F_{s=-1}}} = \sqrt{2m\left(\epsilon_F + \frac{1}{2} g\mu_B H\right)}.$$

Максимальное число $n_{\max}(s)$ цилиндров внутри сферы, соответствующей данному значению s , определяется двойным неравенством

$$n_{\max}(s) < \frac{\epsilon_F - \frac{\hbar\omega_c}{2} - \frac{1}{2} s g\mu_B H}{\hbar\omega_c} < n_{\max}(s) + 1. \quad (6.44)$$

Таким образом, учет спинового вырождения приводит к появлению двух систем цилиндров Ландау, соответствующих двум проекциям спина электрона на направление магнитного поля. Обе системы цилиндров геометрически совпадают друг с другом, однако каждая из них вложена в свою «сферу Ферми», радиус которой зависит от ориентации спина и величины магнитного поля H . В связи с этим выход n -го цилиндра одной системы за пределы своей «сферы Ферми» происходит не одновременно с выходом n -го цилиндра другой системы.

Совершенно аналогичную интерпретацию эффекту спинового расщепления уровней Ландау можно дать при помощи энергетической диаграммы, соответствующей $p_z=0$ (см. рис. 158). При увеличении магнитного поля уровни с различными n и s в некоторой последовательности, зависящей от отношения величины спинового и орбитального расщепления, пересекают границу ферми-распределения $\epsilon=\epsilon_F$ (рис. 170, а), при этом каждый раз парабола, выходящая из-под уровня Ферми, освобождается от электронов, ко-

торые пересекают на нижние уровни. Однако вместо этого можно построить одну диаграмму уровней $(n + 1/2)\hbar\omega_c$, но ввести для каждого значения $s = \pm 1$ зависящую от магнитного поля свою границу ферми-распределения $\Omega_{F_{s=\pm 1}} = \epsilon_F \pm \frac{1}{2} g\mu_B H$.

Особенности плотности состояний возникают всякий раз, когда уровни пересекают как ту, так и другую границы. Такой способ интерпретации иногда более удобен при анализе осцилляционных зависимостей различных характеристик металла от магнитного поля и будет использоваться в дальнейшем.

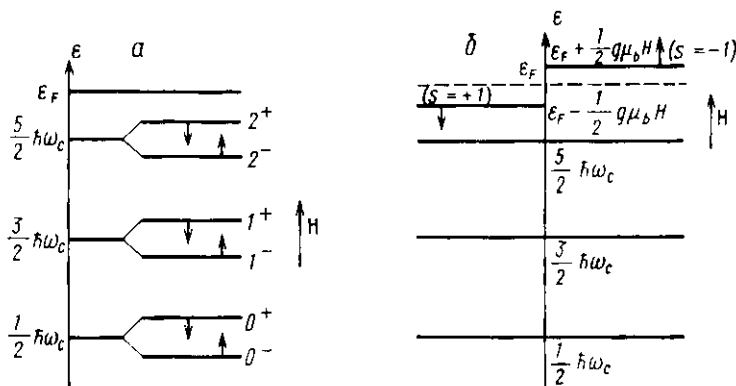


Рис. 170

При переходе к ультраквантовому пределу ниже уровня Ферми остается один 0^- -уровень Ландау, на котором концентрируются все электроны *).

Движение уровня 0^- по шкале энергии определяется соотношением между величиной спинового и орбитального расщепления. Так, при $m_s^* = m_c^*$ энергия этого уровня при любом значении магнитного поля равна нулю.

Учитывая выражение (6.12) для плотности электронных состояний на каждой параболе Ландау с данными n и s , нетрудно показать, что полная плотность электронных состояний $\gamma_H(\epsilon)$ при наличии спинового расщепления записывается в виде

*) При освобождении от электронов очередного уровня Ландау, соответствующего данному направлению спина, электроны переходят на более низкие уровни. При этом переход может осуществляться как на уровне с тем же направлением спина, так и на уровне с обратным направлением спина. Во втором случае при переходе должен происходить переворот спина электрона. Такой процесс при некоторых условиях (например, в параллельных электрическом и магнитном полях $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}$) может быть запрещен. При этом в ультраквантовом пределе магнитных полей заполненным остается не один уровень Ландау 0^- , а два 0^+ и 0^- с противоположными направлениями спинов электронов.

$$v_{II}(\epsilon) = \frac{\hbar\omega \cdot m^{3/2}}{2\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sum_{s=\pm 1} \sum_{n=0}^{n=n_\epsilon(s)} \left[\epsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c - \frac{1}{2} \operatorname{sgn}_B H \right]^{-1/2}, \quad (6.45)$$

где величина $n_\epsilon(s)$ для каждого значения ϵ и s определяется двойным неравенством

$$n_\epsilon(s) < \frac{\epsilon - \frac{\hbar\omega_c}{2} - \frac{1}{2} \operatorname{sgn}_B H}{\hbar\omega_c} < n_\epsilon(s) + 1. \quad (6.46)$$

§ 4. ИЗМЕНЕНИЕ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Квантование энергии электронов в магнитном поле вызывает изменение свободной энергии F электронной системы и связанных с ней термодинамических параметров — энтропии, объема и т. д. Изменение свободной энергии состоит из двух частей: монотонно зависящей от магнитного поля и осциллирующей в магнитное поле. Чтобы выяснить физическую природу этого явления и оценить величину изменения свободной энергии, рассмотрим простейшую модель системы квазичастиц с квадратичным изотропным законом дисперсии $\epsilon = p^2/2m$. При $H=0$ разрешенные электронные состояния такой системы равномерно заполняют сферу радиуса $p_F = \sqrt{2m\epsilon_F}$ с плотностью $V/(2\pi\hbar)^3$, где V — объем кристалла. Как и ранее, для удобства будем рассматривать кристалл единичного объема $V=1$.

В квантующем магнитном поле $H > H_i$ происходит перераспределение электронных состояний в $\mathbf{p}$ -пространстве, которое описано выше (см. § 2 гл. 6). Это перераспределение определяет изменение энергии всей системы электронов в магнитном поле. Разделим энергию ϵ электрона на две составляющие: $\epsilon_\perp$ и $\epsilon_\parallel$ (см. § 1 гл. 6). При любом фиксированном значении p_z разрешенные значения $\epsilon_\perp$ представляют собой уровни энергии двумерной системы электронов. Каждый из этих уровней сильно вырожден, степень вырождения N_d определяется количеством различных чисел n_x и n_y , сумма квадратов которых постоянна и равна $2m\epsilon_\perp/(2\pi\hbar)^2$. Нетрудно видеть, что степень вырождения уровня составляет $N_d = 2\pi p/2\pi\hbar = \sqrt{2m\epsilon_\perp}/\hbar$ и растет пропорционально $\sqrt{\epsilon_\perp}$. При переходе с одного уровня на соседний энергия электронов возрастает на величину

$$\Delta\epsilon = \frac{p \Delta p}{m} = \frac{2\pi\hbar \sqrt{2m\epsilon}}{m},$$

также пропорциональную $\sqrt{\epsilon}$. В результате этого при фиксированном значении p_z число электронных состояний на единичном ин-

тервале энергии, которое с учетом двойного вырождения по спину равно удвоенному произведению числа уровней $2/\Delta\varepsilon$ на степень вырождения уровня N_d , не зависит от энергии и составляет

$$\frac{2N_d}{\Delta\varepsilon} = \frac{2m}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2m\varepsilon}} \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar} = \frac{m}{\pi\hbar^2}.$$

Как и следовало ожидать, эта величина совпадает с вычисленной в § 1 гл. 4 постоянной плотностью состояний (4.7) двумерной электронной системы в кристалле с единичной площадью.

Рассмотрим теперь разрешенные состояния трехмерной электронной системы на плоскости в координатах ε , p_z . Уровни энергии при $p_z=0$ нанесены в виде черточек на вертикальной оси, расстояния между которыми возрастают $\sim \sqrt{\varepsilon}$ (рис. 171). Каждый уровень $\varepsilon_\perp$ при $p_z=0$ на оси ε дает начало квадратичной параболе

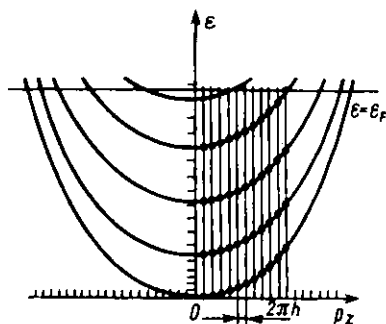


Рис. 171

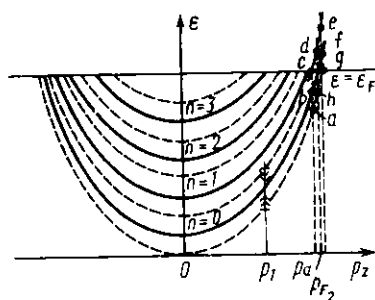


Рис. 172

$p_z^2/2m + \varepsilon_\perp$; некоторые из таких парабол показаны на рис. 171. Разрешенные состояния по импульсу p_z образуют на оси p_z квазинепрерывный спектр эквидистантных точек, расположенных на расстояниях $2\pi\hbar$ друг от друга.

Таким образом, электронные состояния трехмерной системы в координатах ε , p_z являются точками пересечения вертикальных прямых, проходящих через разрешенные значения p_z с параболой, которые берут начало в разрешенных значениях энергии $\varepsilon_\perp$ при $p_z=0$. Плотность таких точек убывает при увеличении энергии как $1/\sqrt{\varepsilon}$, и одновременно с этим как $\sqrt{\varepsilon}$ растет степень вырождения каждой точки. Вследствие этого число электронных состояний, приходящихся на единичную площадку в плоскости ε , p_z , постоянно и не зависит от расположения этой площадки.

При $T=0$ К занятые электронные состояния расположены на площади, ограниченной уровнем Ферми $\varepsilon_F = \varepsilon$ и параболой $\varepsilon = p^2/2m$.

Расчет изменения энергии электронов в квантующем магнитном поле проведем вначале без учета спина электрона и спино-

вого расщепления уровней Ландау. Будем считать, что магнитное поле удовлетворяет условию применения квазиклассического приближения $\hbar\omega_c \ll \epsilon_F^0$, но, с другой стороны, поле H достаточно велико, так что в полосе энергии $\hbar\omega_c$ содержится большое число уровней энергии ϵ_- при $H=0$: $\hbar\omega_c \gg \Delta\epsilon$.

В магнитном поле степень вырождения каждого состояния по p_z составляет $|e|H/\pi\hbar c$. При этом на параболу Ландау стягиваются все состояния, падавшие при $H=0$ на всех параболах спектра, заключенных между соседними пунктирными параболой на рис. 172. Такой процесс стягивания состояний в квантующем магнитном поле описан в § 1 и 2 гл. 6 и проиллюстрирован рис. 155 и 162. При энергиях $\epsilon \ll \epsilon_F - \hbar\omega_c$ процесс стягивания состояний идет без изменения совокупной энергии электронов, состояния которых конденсируются на параболу Ландау. При этом переход от квазинепрерывного спектра при $H=0$ к квантованному при каждом разрешенном значении p_z можно рассматривать как результат стягивания вертикальных отрезков длиной $\hbar\omega_c$ в точку, расположенную на параболе Ландау. На верхней половине этого отрезка длиной $\hbar\omega_c/2$ электроны уменьшают свою энергию, но это полностью компенсируется увеличением энергии электронов на нижней половине отрезка (см. стягивание отрезка $\hbar\omega_c$ при $p_z=p_1$ в точку на параболе с $n=0$ на рис. 172).

Иначе обстоит дело в полосе энергий $\hbar\omega_c$ вблизи уровня Ферми. Выберем одну из парабол, например с $n=0$, и рассмотрим, как перераспределяются электроны в ее верхней части (см. рис. 172). В квазиклассическом приближении $\hbar\omega_c \ll \epsilon_F^0$ участки парабол ce , bf , ag можно заменить прямыми линиями (рис. 173).

Число состояний на участке blf параболы Ландау равно числу состояний, которые были расположены на площади параллелограмма $aceg$ при $H=0$. Заполненные при $H=0$ состояния занимали площадь треугольника acg , расположенного под уровнем Ферми. Число таких состояний в точности соответствует вместимости половины куска параболы Ландау bl , который расположен ниже уровня Ферми при $H=0$. Такая ситуация имеет место на всех других параболах Ландау, за исключением самой верхней заполненной электронами параболы, дно которой отстоит от уровня Ферми менее чем на величину $\hbar\omega_c$. Отсюда следует, что если пренебречь влиянием электронов на верхней параболе на положение уровня Ферми, то величина ϵ_F в квазиклассическом приближении не должна изменяться при включении квантующего магнитного поля. Поскольку число парабол Ландау является величиной порядка $\epsilon_F^0/\hbar\omega_c$, вклад электронов на верхней параболе в изменение энергии Ферми в магнитном поле может быть эффектом второго порядка малости по параметру $(\hbar\omega_c/\epsilon_F^0)^{1/2}$. Однако при вычислении монотонной части изменения свободной энергии F электронов в магнитном поле им можно пренебречь.

Для того чтобы оценить изменение энергии электронов при образовании параболы с $n=0$, сравним энергию электронов, за-

полняющих при $H=0$ треугольник acg , и энергию тех же электронов на соответствующем участке параболы Ландау bl в квантованном спектре. В квазиклассическом приближении при $\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F^0$ изменением плотности электронных состояний на отрезке bl параболы можно пренебречь. Поэтому энергия электронов $\varepsilon(H)$ на этом отрезке равна значению энергии $\varepsilon_F^0 - \hbar\omega_c/4$, соответствующей середине отрезка, умноженному на число электронных состояний ΔN на всем отрезке:

$$\varepsilon(H) = \Delta N \cdot \left(\varepsilon_F^0 - \frac{\hbar\omega_c}{4} \right). \quad (6.47)$$

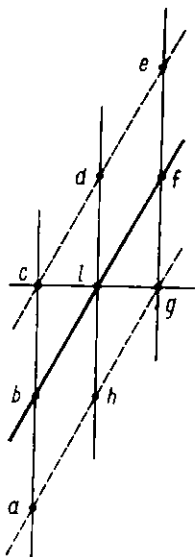


Рис. 173

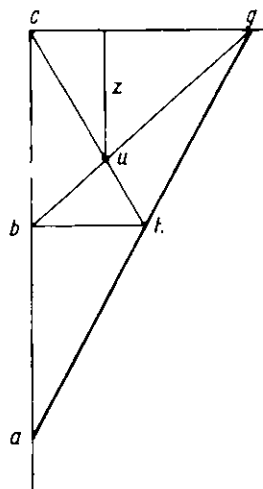


Рис. 174

Энергия $\varepsilon(0)$ тех же электронов при $H=0$, заполняющих треугольник acg , равна произведению их числа ΔN на среднее значение энергии, соответствующее точке u центра тяжести треугольника. Центр тяжести треугольника расположен на пересечении медиан bg и ch (рис. 174). Обозначим через z расстояние от центра тяжести треугольника до уровня Ферми. Энергия $\varepsilon(0)$ может быть записана в виде

$$\varepsilon(0) = \Delta N (\varepsilon_F^0 - z).$$

Треугольники ucg и ubh подобны, откуда имеем

$$\frac{cg}{bh} = \frac{z}{cb - z} = 2 \text{ и } z = \frac{cb}{3} = \frac{\hbar\omega_c}{3}.$$

Следовательно, энергия электронов $\epsilon(0)$ равна

$$\epsilon(0) = \Delta N \cdot \left(\epsilon_F^0 - \frac{\hbar\omega_c}{3} \right). \quad (6.48)$$

Проведенный расчет $\epsilon(H)$ и $\epsilon(0)$ применим ко всем параболам Ландау, кроме самой верхней из заполненных парабол, находящейся вблизи уровня Ферми. В результате видно, что при образовании параболы Ландау в магнитном поле энергия электронов, относящихся к одной параболе, возрастает на величину

$$2[\epsilon_n(H) - \epsilon_n(0)] = 2\Delta N_n \left(\frac{\hbar\omega_c}{3} - \frac{\hbar\omega_c}{4} \right) = \Delta N_n \cdot \frac{\hbar\omega_c}{6}, \quad (6.49)$$

где ΔN_n — число электронов на соответствующем куске n -й параболы Ландау. Множитель 2 в выражении (6.49) учитывает тот факт, что парабола Ландау дважды пересекает уровень Ферми при $+p_z$ и при $-p_z$.

Число электронных состояний ΔN_n нетрудно вычислить. Для параболы с номером 0 оно равняется числу состояний $\frac{cg}{2 \cdot 2\pi\hbar}$ по p_z на куске параболы bl , умноженному на степень вырождения состояния в магнитном поле $\frac{|e|H}{\pi\hbar c}$. Для параболы с произвольным номером n величину cg нужно заменить разностью импульсов $\Delta p_n = p_{zn+1} - p_{zn}$, которые соответствуют точкам пересечения с уровнем Ферми пунктирных парабол, соседних с n -параболой Ландау. Импульсы p_{zn+1} и p_{zn} определяются уравнениями

$$\hbar\omega_c \cdot n = \epsilon_F^0 - \frac{p_{zn+1}^2}{2m}, \quad (6.50)$$

$$\hbar\omega_c (n+1) = \epsilon_F^0 - \frac{p_{zn}^2}{2m},$$

из которых следует, что

$$\frac{p_{zn+1}^2 - p_{zn}^2}{2m} = \hbar\omega_c, \quad (6.51)$$

$$\Delta p_n = p_{zn+1} - p_{zn} = \frac{m \cdot \hbar\omega_c}{p_{zn}}. \quad (6.52)$$

где

$$\bar{p}_{zn} = \frac{p_{zn+1} + p_{zn}}{2} = \sqrt{2m \left[\epsilon_F^0 - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]}.$$

Таким образом, число электронов ΔN_n на куске параболы с номером n равно

$$\Delta N_n = \frac{\Delta p_n}{2 \cdot 2\pi\hbar} \cdot \frac{|e|H}{\pi\hbar c} = \frac{m^2 (\hbar\omega_c)^2}{4\pi^2 \hbar^3 \bar{p}_{zn}}. \quad (6.53)$$

Изменение энергии электронов при образовании параболы Ландау с номером n равно

$$2[\varepsilon_n(H) - \varepsilon_n(0)] = \frac{\hbar\omega_c}{6} \cdot \frac{m^2 (\hbar\omega_c)^2}{4\pi^2 \hbar^3 \bar{p}_{zn}} = \frac{m^2 (\hbar\omega_c)^3}{24\pi^2 \hbar^3 \bar{p}_{zn}}. \quad (6.54)$$

С точностью до вклада от самой верхней параболы Ландау общее увеличение свободной энергии δF электронной системы в магнитном поле равно сумме выражений (6.54) по всем параболам с номерами от 0 до $n_{\max}-1$:

$$\delta F = \frac{m^2 (\hbar\omega_c)^3}{24\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n_{\max}-1} \frac{1}{\bar{p}_{zn}}, \quad (6.55)$$

где $n_{\max}$ определяется неравенствами (6.17).

В квазиклассическом приближении $\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F^0$ сумму $\sum_{n=0}^{n_{\max}-1} \frac{1}{\bar{p}_{zn}}$

в выражении (6.55) можно заменить интегралом

$$\int_0^{n_{\max}-1} \left[2m \left(\varepsilon_F^0 - \left(x + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right) \right]^{-1/2} dx,$$

который с той же точностью равен $\frac{1}{m\hbar\omega_c} \sqrt{2m\varepsilon_F^0}$. Таким образом, свободная энергия F электронной системы в квантующем магнитном поле повышается на величину

$$\delta F' = \frac{m (\hbar\omega_c)^2 \sqrt{2m\varepsilon_F^0}}{24\pi^2 \hbar^3} = \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right)^2 \frac{mp_F}{6\pi^2 \hbar^3} H^2, \quad (6.56)$$

пропорциональную H^2 . В результате этого электронная система без учета спина должна обладать постоянной диамагнитной восприимчивостью

$$\chi_d = - \frac{\partial^2 \delta F'}{\partial H^2} = - \frac{mp_F}{3\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{e\hbar}{2mc} \right)^2. \quad (6.57)$$

Полученные на основе геометрических соображений значения $\delta F'$ (6.56) и χ_d (6.57) совпадают с результатами строгого расчета, выполненного на основе вычисления термодинамического потенциала электронного газа в квазиклассическом приближении (см., например: Абрикосов А. А. Введение в теорию нормальных металлов. М.: «Наука», 1972. С. 175—177). Диамагнетизм газа свободных электронов был предсказан Л. Д. Ландау в 1930 г. Вследствие этого описанное явление получило название диамагнетизма Ландау.

Учтем теперь спиновое расщепление уровней Ландау. В этом случае каждая из рассматриваемых выше парабол Ландау рас-

щепляется на две подпараболы, что вызывает дополнительное изменение энергии электронной системы $\delta F''$. Изменение энергии $\delta F''$ вследствие спинового расщепления уровней удобно сравнивать по величине и знаку с изменением энергии $\delta F'$ (5.56) в том же магнитном поле.

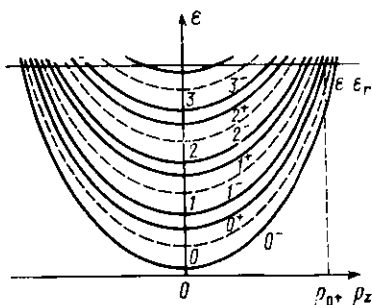


Рис. 175

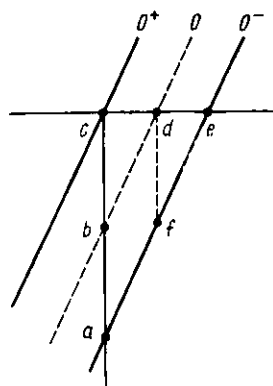


Рис. 176

На рис. 175 показано, как видоизменяется картина парабол на рис. 172 при учете спинового расщепления. Пунктиром изображены исходные нерасщепленные параболы, сплошные линии — параболы $n^\pm$, соответствующие двум ориентациям спина при $m_s^* > m_c^*$. Заменим, как и ранее, участки парабол вблизи уровня Ферми прямыми линиями и рассмотрим для примера параболу с номером 0. При значениях $p_z < p_0^+$ энергия электронов, находящихся на нерасщепленной 0-параболе, не меняется при расщеплении уровней по спину, поскольку при этом одна половина электронов понижает свою энергию на $\frac{1}{2}g\mu_B H$, переходя на подпараболу 0^- , другая половина — увеличивает свою энергию на ту же величину, переходя на подпараболу 0^+ . Изменение энергии электронов при расщеплении происходит только за счет перехода электронов с участка bd исходной 0-параболы (рис. 176) на участок ae подпараболы 0. Заметим, что степень вырождения каждого состояния по p_z на $n^\pm$ подпараболах вдвое меньше, чем на нерасщепленных n -параболах. Поэтому вместимость участка bd на рис. 176 точно равна вместимости участка ae . Таким образом, электроны с участка bd целиком заполняют участок ae после расщепления. То же самое происходит при расщеплении всех других парабол, за исключением самой верхней из заполненных электронами парабол. Сравнение энергии электронов на участках bd и ae показывает, что расщепление уровней по спину вызывает уменьшение энергии системы. Действительно, половина электронов с участка bd переходит на участок fe без изменения их общей энергии, дру-

гая же половина переходит на участок af с уменьшением энергии каждого электрона на величину $ab=fd=\frac{1}{2}g\mu_B H$.

Таким образом, уменьшение $\delta\epsilon_0$ энергии электронов на 0-параболе в результате ее расщепления по спину равно

$$\delta\epsilon_0 = -2 \frac{\Delta N_0}{2} \cdot \frac{1}{2} g\mu_B H,$$

где ΔN_0 — число электронов на участке bd (здесь учтено, что 0-парабола дважды, при $+p_z$ и $-p_z$, пересекает уровень Ферми). Аналогично уменьшение энергии электронов на n -й параболе составляет

$$\delta\epsilon_n = -2 \frac{\Delta N_n}{2} \cdot \frac{1}{2} g\mu_B H,$$

где ΔN_n — число электронов на соответствующем участке параболы. Вычисляя ΔN_n , как и в случае нерасщепленных парабол, нетрудно показать, что

$$\delta\epsilon_n = -\frac{1}{2} \frac{|e|m_c^*}{\pi^2 \hbar^2 c} \left(\frac{g\mu_B}{2} \right)^2 \frac{H^3}{\sqrt{2m_c^* \left[\epsilon_F^0 - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]}}. \quad (6.58)$$

Изменение $\delta F''$ свободной энергии при расщеплении уровней определяется суммой $\sum_{n=0}^{n_{\max}-1}$, которую можно заменить интегралом.

Окончательно получим

$$\delta F'' = - \left(\frac{g\mu_B}{2} \right)^2 \frac{m_c^* p_F}{2\pi^2 \hbar^3} H^2. \quad (6.59)$$

Уменьшение энергии на величину $|\delta F''|$ в магнитном поле, вызванное расщеплением уровней Ландау по спину, соответствует не зависящему от H парамагнитному вкладу χ_p в магнитную восприимчивость:

$$\chi_p = - \frac{\partial^2 \delta F''}{\partial H^2} = - \frac{m_c^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{eh}{2m_c^* c} \right), \quad (6.60)$$

который определяется величиной спиновой эффективной массы m_s^* . Проведенный выше расчет справедлив при любом значении $m_s^* \geq m_c^*$. В частности, при $m_s^* = m_c^*$ величина χ_p втрое превышает абсолютное значение $|\chi_d|$ (6.57). Это означает, что газ свободных электронов парамагнитен и обладает восприимчивостью, равной

$$\chi^c = \chi_p^c + \chi_d^c = \frac{2}{3} \frac{m_0 p_F}{\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{eh}{2m_0 c} \right). \quad (6.61)$$

Парамагнитный вклад χ_p (6.60) в восприимчивость является результатом того, что в магнитном поле возникает поляризация эффективных магнитных моментов $\mu^* = \frac{e\hbar}{2m_s c}$ электронов, связанных

со спином, и эта поляризация приводит к появлению полного магнитного момента системы, направленного по полю. Это явление называется спиновым парамагнетизмом, или парамагнетизмом Паули.

Парамагнитную восприимчивость Паули в квазиклассических полях можно рассчитать также следующим простым способом.

Энергия взаимодействия магнитного момента электрона с внешним полем равна $-(\mu^* \cdot \mathbf{H})$. Поэтому если момент электрона направлен вдоль магнитного поля, то его энергия будет равна $\varepsilon - \mu^* H$, а если момент противоположен полю, то $\varepsilon + \mu^* H$. При

$T=0$ и $H=0$ концентрация электронов равна $n = \int_0^{\varepsilon_F^0} v^{III}(\varepsilon) d\varepsilon$.

В магнитном поле концентрации электронов с ориентацией магнитного момента по полю (n_+) и против поля (n_-) отличаются друг от друга. Для их вычисления в квазиклассических магнитных полях $\hbar\omega_c \ll \varepsilon_F^0$ можно воспользоваться выражением для $v^{III}(\varepsilon)$ (4.2) при $H=0$ (см. рис. 177):

$$n_+ = \frac{1}{2} \int_0^{\varepsilon_F^0 + \mu^* H} v^{III}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (6.62)$$

$$n_- = \frac{1}{2} \int_0^{\varepsilon_F^0 - \mu^* H} v^{III}(\varepsilon) d\varepsilon.$$

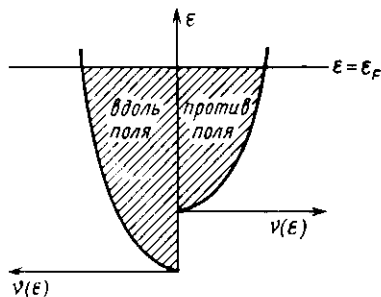


Рис. 177

Полный магнитный момент M единицы объема равен

$$M = \mu^* (n_+ - n_-) = \frac{1}{2} \mu^* \int_{\varepsilon_F^0 - \mu^* H}^{\varepsilon_F^0 + \mu^* H} v^{III}(\varepsilon) d\varepsilon =$$

$$= \frac{1}{2} \mu^* \frac{8\sqrt{2}\pi}{(2\pi\hbar)^3} (m_s^*)^{3/2} \int_{\varepsilon_F^0 - \mu^* H}^{\varepsilon_F^0 + \mu^* H} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon.$$

При

$$\mu^* H \ll \epsilon_F^0 \quad (6.63)$$

$$M = \frac{m_c^* p_F}{\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{e \hbar}{2 m_s^* c} \right) H.$$

Определенная отсюда парамагнитная восприимчивость $\chi_p = \frac{\partial M}{\partial H}$ совпадает с полученным ранее значением (6.60).

Таким образом, в металле с простейшим законом дисперсии электронов $\epsilon = p^2/2m$ отношение диамагнитной части восприимчивости к парамагнитной составляет

$$\frac{|\chi_d|}{\chi_p} = \frac{1}{3} \left(\frac{m_s^*}{m_c^*} \right)^2. \quad (6.64)$$

Эта величина определяется отношением спинowego $\Delta \epsilon_s$ и орбитального $\Delta \epsilon_o$ расщеплений уровней Ландау. При $\Delta \epsilon_s / \Delta \epsilon_o = m_c^* / m_s^* = 1/\sqrt{3}$ спиновый парамагнетизм Паули полностью компенсирует диамагнетизм Ландау у электронного газа в металле. При большей величине спинowego расщепления электронный газ становится парамагнитным.

Проведенный выше расчет диамагнетизма электронов в металле относится лишь к простейшей модели. В действительности рассчитать диамагнетизм гораздо труднее, так как в него дают существенный вклад виртуальные переходы из глубоких электронных состояний в зону проводимости.

Рассмотренные выше добавки $\delta F' \sim H^2$ и $\delta F'' \sim H^2$ к свободной энергии электронной системы в магнитном поле получены в пренебрежении вкладом от электронов на параболе или подпараболе Ландау с номером $n_{\max}$, дно которой расположено близко к уровню Ферми.

Рассмотрим теперь вклад электронов на последней параболе, который определяет осциллирующую в магнитном поле составляющую свободной энергии. Для простоты вновь не будем рассматривать спиновое расщепление уровней Ландау. Рассмотрение процесса последовательного выхода парабол Ландау из-под уровня Ферми начнем с момента, в который дно параболы с номером $n_{\max} + 1$ касается уровня Ферми, а дно следующей $n_{\max}$ -параболы отстоит от него на величину $\hbar \omega_c$ (рис. 178). Прежде всего обратим внимание на то, что вблизи дна параболы замена ее участков прямыми линиями становится некорректной. При этом площади криволинейных «треугольников» $c'd'l'$ и $h'l'g'$ перестают быть равными, в результате чего число состояний в «треугольнике» $a'c'g'$ при $H=0$ становится не равным числу состояний на участке $b'l'$ параболы Ландау при $H \neq 0$. Это означает, что при образовании параболы Ландау с номером $n_{\max}$ в магнитном поле в результате

стягивания всех состояний между двумя соседними пунктирными параболой, отстоящими от нее по вертикали на величину $\pm \hbar \omega_c / 2$, граница заполнения на параболе Ландау не совпадает с уровнем Ферми при $H=0$. Действительно, число состояний на участке $b'l'$ параболы Ландау равно числу состояний, которые при $H=0$ были расположены на площади, ограниченной замкнутой линией $a'c'd'h'$. Эта площадь может быть равна площади криволинейного «треугольника» $a'c'g'$, с которого происходит конденсация состояний на участок $b'l'$, только при условии равенства пло-

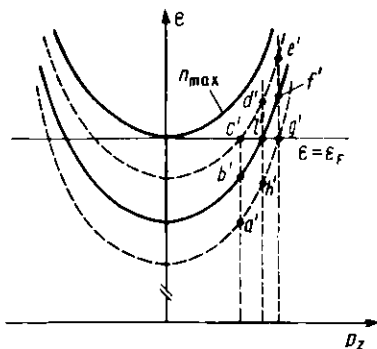


Рис. 178

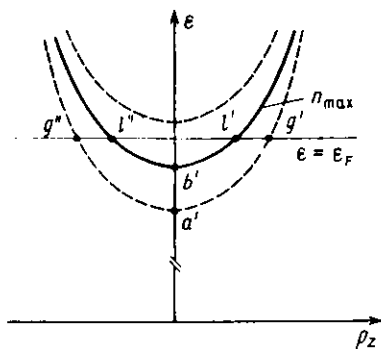


Рис. 179

щадей «треугольников» $c'd'l'$ и $h'l'g'$. Обозначим границу заполнения параболы с номером $n_{\max}$ через $\epsilon_{n_{\max}}$. Если величина $\epsilon_{n_{\max}} < \epsilon_F^0$, то электроны со всех парабол с номерами от 0 до $n_{\max}-1$, которые были заполнены до границы ϵ_F^0 , перетекают на свободные места на $n_{\max}$ -параболе. В результате энергия Ферми в магнитном поле несколько понизится. Если же $\epsilon_{n_{\max}} > \epsilon_F^0$, то происходит обратный процесс перетекания электронов с $n_{\max}$ -параболы на все остальные, что приведет к некоторому увеличению энергии Ферми. При движении $n_{\max}$ параболы вверх размер ее участка, расположенного ниже уровня Ферми, уменьшается быстрее, чем увеличивается степень вырождения состояний в магнитном поле ($\sim H$), в результате чего емкость этого участка все время уменьшается. При некотором значении H емкость участка $l''b'l'$ $n_{\max}$ -параболы становится меньше числа состояний между пунктирной параболой $g''a'g'$ (рис. 179) и уровнем Ферми. Создается ситуация, при которой $\epsilon_{n_{\max}} > \epsilon_F^0$. Это превышение возрастает по мере дальнейшего укорочения участка $l''b'l'$, что приводит к увеличению ϵ_F вплоть до выхода $n_{\max}$ параболы. Поэтому энергия Ферми проходит через локальный максимум при выходе очередного уровня Ландау и имеет локальный минимум в интервале между выходами соседних уровней Ландау. Можно показать, что в локальных минимумах $\epsilon_F(H) < \epsilon_F^0$.

Таким образом, в результате последовательного выхода уровней Ландау за уровень Ферми к монотонной составляющей свободной энергии электронов в магнитном поле добавляется осциллирующая составляющая, которая в квазиклассическом приближении меняется периодически в обратном магнитном поле. Осциллирующая составляющая свободной энергии является причиной осциллирующей магнитной восприимчивости, которые носят название эффекта де Гааза — ван Альфена.

§ 5. МАГНИТНЫЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ УРОВНИ

В § 1 настоящей главы рассмотрено квантование энергии электронов, которое является следствием их циклического движения по замкнутым или спиральным траекториям в магнитном поле. Такое движение электронов происходит в кристалле неограниченных размеров, траектории при этом полностью определяются сечением поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю, и величиной скорости в направлении магнитного поля. Ничем неограниченное на длине свободного пробега перемещение электрона по орбите в магнитном поле не является единственным типом циклического движения, которое подлежит квантованию.

В настоящем разделе рассматривается квантование энергии электронов в магнитном поле в тех случаях, когда их орбиты ограничены поверхностью металла. Анализ взаимодействия электронов с поверхностью металла показывает, что существует определенная группа электронов, движущихся в приповерхностном слое по циклическим траекториям. Остановимся на этом вопросе подробнее.

Рассмотрим металл, который находится в магнитном поле, параллельном его поверхности, полированной до оптической чистоты, т. е. такой, что ее шероховатости по порядку величины близки к длине световой волны $\lambda_c \sim 10^{-4}$ см. Поскольку де-бройлевская длина волны λ_B фермиевских электронов в металле значительно меньше λ_c , то электроны, подходящие к поверхности металла под большими углами, должны испытывать хаотическое отражение от больших шероховатостей. Такое рассеяние электрона на поверхности называется диффузным, при этом электрон равновероятно отражается под любым углом к поверхности.

Однако при достаточно малых углах α подхода к поверхности де-бройлевская длина волны $\lambda_{B\perp}$ электрона в направлении нормали, равная λ_B/α , может стать больше, чем величина шероховатости. При такой ситуации должно происходить зеркальное отражение электронов, подобно тому, как отражается от матовой поверхности свет при косом падении. Очевидно, величина угла подхода для зеркального отражения ограничена значением $\alpha < \lambda_B/\lambda_c$ ($\sim 10^{-3}$ в нормальных металлах).

Рассмотрим траектории электронов в виде дуг, центры которых лежат вне металла. В достаточно слабом магнитном поле при малых углах подхода к поверхности электрон испытывает зер-

кальное отражение, и последующий участок траектории воспроизводит предыдущий. Такие траектории получили название «скачущих». При перемещении по скачущей траектории движение электрона по нормали к поверхности является периодическим и, следовательно, квантуется. В результате этого возникают дискретные уровни энергии электрона, которые получили название магнитных поверхностных уровней. Проведем вначале квазиклассическое квантование энергии электрона, движущегося по скачущей траектории, в простейшем случае изотропного квадратичного закона дисперсии. При этом дуга траектории на рис. 180 пред-

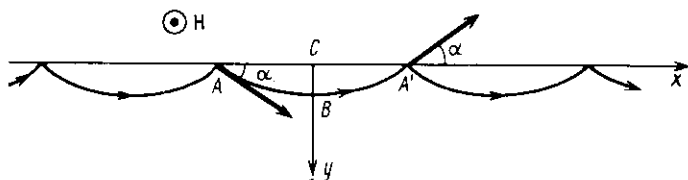


Рис. 180

ставляет собой дугу окружности. В импульсном пространстве движению по скачущей траектории соответствует движение изображающей точки по замкнутой орбите, ограничивающей заштрихованный сегмент сечения поверхности Ферми плоскостью, перпендикулярной магнитному полю, на рис. 181. Действительно, в ре-

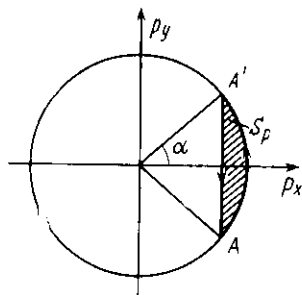


Рис. 181

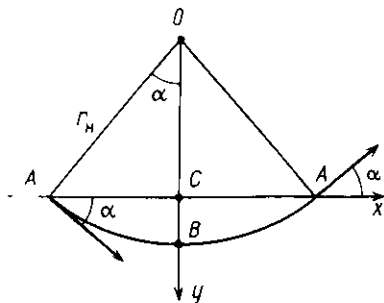


Рис. 182

зультате зеркального отражения от поверхности в точке A' траектории на рис. 181 происходит скачкообразное изменение направления скорости и импульса электрона на угол 2α без изменения их абсолютной величины. Этот процесс эквивалентен скачку из точки A' в точку A на рис. 181.

Воспользуемся формулой Лифшица — Онзагера для квантования площадей орбит S_p в импульсном пространстве и заменим

S_p на площадь S_r , заключенную между одной из дуг скачущей траектории и поверхностью металла (рис. 180):

$$S_r = \left(\frac{c}{eH} \right)^2 S_p. \quad (6.65)$$

Эта же площадь может быть выражена через радиус дуги $r_H = \frac{cp_F}{|e|H}$ и угол подхода α : S_r и равна разности площадей сектора $AA'O$ и треугольника $AA'O$ (рис. 182):

$$S_r = \frac{2\alpha}{2\pi} \pi r_H^2 - r_H \cos \alpha \cdot r_H \sin \alpha.$$

При малых значениях угла $\alpha \ll 1$ с точностью до величин порядка

$$S_r = \alpha r_H^2 - \left(1 - \frac{\alpha^2}{2} \right) \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{6} \right) r_H^2 = \frac{2}{3} \alpha^3 r_H^2.$$

Величину α в свою очередь можно выразить через высоту CB сегмента $ACA'B$: $CB = r_H(1 - \cos \alpha)$. Окончательно получим

$$S_r = \frac{4}{3} [2r_H \cdot (CB)^3]^{1/2}. \quad (6.66)$$

Согласно формуле для квантования площадей S_p и выражению (6.65) площадь S_r орбиты при данном значении магнитного поля зависит от квантового числа n :

$$(S_r)_n = \left(\frac{c}{|e|H} \right)^2 (S_p)_n = \left(\frac{c}{eH} \right)^2 \frac{2\pi |e| \hbar H}{c} (n + \gamma), \quad (6.67)$$

откуда высота сегмента CB также является квантованной величиной:

$$(CB)_n = y_n = \left(\frac{3\pi \hbar}{2\sqrt{2}} \right)^{2/3} \left(\frac{c}{|e| p_F H} \right)^{1/3} (n + \gamma)^{2/3}. \quad (6.68)$$

Разрешенные уровни энергии теперь можно найти следующим простым способом. На электрон, движущийся по скачущей траектории, действует сила Лоренца $-\frac{|e|\hbar}{c} [\mathbf{v} \cdot \mathbf{H}]$, которая при $\alpha \ll 1$ направлена практически по нормали к поверхности металла и равна $\frac{|e|\hbar}{c} v_F H$. При каждом столкновении с поверхностью электрон отражается с нормальной компонентой скорости $v_y = \alpha v_F$, которая обращается в нуль в точке поворота траектории на глубине $y = y_n$. Таким образом, движение электрона в направлении оси y эквивалентно движению в потенциальной яме, образованной бесконечно высокой потенциальной стенкой на границе металла при $y=0$ и линейно-возрастающим в глубь металла потенциалом $V(y) = \frac{|e|\hbar}{c} v_F H y$ (рис. 183). Движение электрона, скачущего по

поверхности металла, аналогично движению упругого шарика, скачущего по жесткой горизонтальной поверхности в поле силы тяжести. Квантованное значение энергии ϵ_n движения вдоль оси y равно

$$\epsilon_n = \frac{|e|v_F H}{c} y_n = \left(\frac{3\pi\hbar}{2\sqrt{2}} \right)^{2/3} \left(\frac{|e|H}{c} \right)^{2/3} \frac{v_F}{p_F^{1/3}} (n + \gamma)^{2/3}. \quad (6.69)$$

Эта величина определяет дискретные уровни энергии электрона при движении по скачущим траекториям. При таких условиях квантуется только энергия движения по нормали к поверхности металла. Энергия $\epsilon_{||}$ движения параллельно поверхности не квантуется и практически равна энергии Ферми

$$\epsilon_{||} \simeq \epsilon_F = \frac{mv_F^2}{2}.$$

Полная энергия электрона $\epsilon(n, v_F)$, как и в случае обычного квантования в магнитном поле, равна сумме квантованной и неквантованной составляющих:

$$\epsilon(n, v_F) = \epsilon_n + \epsilon_{||}.$$

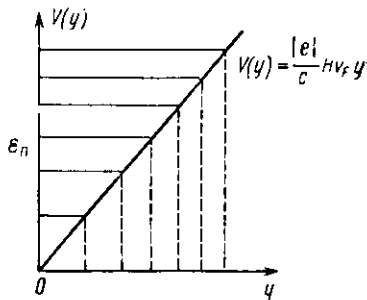


Рис. 183

Как следует из выражения (6.69), уровни энергии ϵ_n пропорциональны $(n + \gamma)^{2/3}$ и не являются эквидистантными. Переходам электронов между различными уровнями энергии ϵ_n и ϵ_k соответствуют частоты $\omega_{n,k}$ линий поглощения или испускания:

$$\omega_{n,k} = \frac{\epsilon_n - \epsilon_k}{\hbar} = \left(\frac{3\pi}{2\sqrt{2}} \right)^{2/3} \left(\frac{|e|H}{c} \right)^{2/3} \frac{v_F}{(\hbar p_F)^{1/3}} [(n + \gamma)^{2/3} - (k + \gamma)^{2/3}], \quad (6.70)$$

где n и k — квантовые числа. Если фиксировать частоту ω и менять магнитное поле, то резонансное поглощение электромагнитных квантов электронами, движущимися по скачущим траекториям, возможно при дискретных значениях магнитного поля $H_{n,k}$, зависящих от квантовых чисел n и k :

$$H_{n,k} = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi} \frac{c}{|e|} \omega^{3/2} \left(\frac{\hbar p_F}{v_F^3} \right)^{1/2} [(n + \gamma) - (k + \gamma)]^{-3/2}. \quad (6.71)$$

В резонансном поглощении участвует группа электронов на поверхности Ферми, для которых одно и то же значение имеет множитель p_F/v_F^3 , входящий в выражение (6.71) для $H_{n,k}$. Эти электроны расположены в узком «пояске» вблизи экстремального сечения поверхности Ферми. Резонанс будет тем сильнее, чем для большего числа электронов удовлетворяется условие $p_F/v_F^3 = \text{const}$. Наилучшие условия для наблюдения резонанса имеют

место тогда, когда поверхность Ферми является цилиндром (или имеет достаточно длинные цилиндрические участки) вдоль оси z .

Резонансное поглощение, связанное с переходами электронов между магнитными поверхностными уровнями, может наблюдаться, например, в виде особенностей поверхностного импеданса металла в поле высокочастотной электромагнитной волны. Такие особенности, наблюдавшиеся при дискретных значениях магнитного поля в области слабых полей порядка единиц эрстед, впервые обнаружены М. С. Хайкиным при исследовании поверхностного импеданса у металлов, имеющих цилиндрические участки поверхности Ферми (висмут, олово, индий, кадмий).

Приведенный выше расчет уровней энергии ϵ_n (6.69), основанный на квазиклассической формуле Лифшица — Оппенгеймера, не является удовлетворительным, поскольку реально резонанс на скачущих траекториях наблюдается в результате переходов между нижними уровнями, соответствующими небольшим значениям квантовых чисел n и k .

Проведем строгое вычисление энергии магнитных поверхностей уровней на основе решения уравнения Шредингера для электрона в магнитном поле. Будем предполагать, что поверхность Ферми электронов является круговым цилиндром с осью вдоль p_z и задается уравнением

$$\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} = \epsilon_F.$$

В магнитном поле, направленном по оси ($\mathbf{H}=0, 0, H$), орбиты электронов представляют собой окружности, расположенные в плоскостях, перпендикулярных поверхности металла. Выберем векторный потенциал магнитного поля в виде $\mathbf{A}=(-yH, 0, 0)$. При этом гамильтониан электрона в приближении эффективной массы может быть записан в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m^*} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{|e|\hbar}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{|e|\hbar}{c} yH \right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(-i \frac{\partial}{\partial y} \right)^2. \quad (6.72)$$

При цилиндрической поверхности Ферми движение электрона вдоль оси цилиндра запрещено. В этом случае волновая функция электрона не зависит от координаты z . У электрона, движущегося по скачущей траектории, периодически меняет знак компонента p_y импульса вдоль оси y , в то же время компонента p_x его импульса вдоль оси x мало меняется, оставаясь близкой к величине импульса Ферми $p_F = \sqrt{2m^*\epsilon_F}$. Обозначим через Δp_x переменную часть компоненты p_x , тогда $p_x = p_F - \Delta p_x$ и $\Delta p_x \ll p_F$. При таких условиях движения электрона его волновая функция осциллирует в направлении оси y и близка к плоской волне в направлении оси x . Будем искать волновую функцию в виде произведения

$\psi(x, y) = f(y) e^{\frac{i p_x x}{\hbar}}$. При этом уравнение Шредингера, определяющее стационарные состояния электрона, имеет вид

$$\left[\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{|e|\hbar}{c} y H \frac{p_x}{m^*} + \left(\frac{e}{c} y H \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} \right] f(y) = \epsilon f(y). \quad (6.73)$$

В слабом магнитном поле изменение компоненты импульса Δp_x и величина $\frac{|e|\hbar}{c} y H$ являются малыми величинами одного порядка. Подставляя $p_x = p_F - \Delta p_x$ в (6.73), с точностью до членов первого порядка малости получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 f}{dy^2} + \frac{|e|\hbar}{c} v_F y H \cdot f = (\epsilon - \epsilon_F + v_F \Delta p_x) f, \quad (6.74)$$

где $v_F = p_F / m^*$.

В этом уравнении величина $\epsilon - \epsilon_F + v_F \Delta p_x$, равная разности между полной энергией ϵ и энергией $\epsilon_{||}$ движения вдоль оси x , представляет собой искомые значения квантованной энергии ϵ_n движения оси y . Таким образом, одномерное уравнение Шредингера (6.74) описывает движение электрона по нормали к поверхности металла в поле сил с потенциалом $\frac{|e|\hbar}{c} v_F y H$, который ранее был использован при решении квазиклассической задачи. Тем самым уравнение (6.74) может служить для строгого обоснования тех физических соображений, которые были использованы при получении формулы (6.69) для уровней энергии ϵ_n .

С помощью обозначений

$$\xi = \beta y, \quad \beta = \left(\frac{2p_F |e| \hbar H}{c \hbar} \right)^{1/3}; \quad \bar{\xi} = \beta \bar{y}, \quad \bar{y} = \frac{\epsilon - \epsilon_F + v_F \Delta p_x}{\frac{|e|\hbar}{c} v_F H}$$

уравнение (6.74) приводится к уравнению Эйри:

$$\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2} - (\xi - \bar{\xi}) f(\xi) = 0, \quad (6.75)$$

решение которого выражается через функцию Эйри $Ai(\xi)$:

$$f(\xi) = \sqrt{\pi} Ai(\xi - \bar{\xi}). \quad (6.76)$$

Зеркальное отражение электронов от поверхности металла соответствует граничному условию $\psi(x, 0) = 0$ при $y = 0$ для волновой функции $\psi(x, y)$. Отсюда следует, что $f(0) = \sqrt{\pi} Ai(-\bar{\xi}) = 0$. Таким образом, величина $-\bar{\xi}$ определяется корнями ξ_n функции Эйри, где $n = 1, 2, 3, \dots$

Известно асимптотическое выражение для корней функции Эйри при $n \gg 1$:

$$\xi_n = \left[\frac{3\pi}{2} \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{2/3}, \quad (6.77)$$

которое с достаточно хорошей точностью дает значения корней и при не очень больших значениях n (так, даже при $n=1$ выражение (6.77) определяет корень ξ_1 с ошибкой менее 1%).

Подставляя в равенство $-\beta \bar{y} = \xi_n$ выражения $\bar{y}$ и β , а также (6.77) для ξ_n , получим следующее значение уровней энергии электрона:

$$\epsilon_n = \left(\frac{3\pi\hbar}{2\sqrt{2}} \right)^{2/3} \left(\frac{|e| \cdot H}{c} \right)^{2/3} \frac{v_F}{\rho_F^{1/3}} \left(n - \frac{1}{4} \right)^{2/3} + \epsilon_F - v_F \Delta p_x, \quad (6.78)$$

в котором первое слагаемое представляет дискретные уровни квантованной энергии ϵ_n движения вдоль оси y , а последующие два слагаемые — неквантованную энергию $\epsilon_{||}$ движения вдоль поверхности металла.

Схема уровней энергии и графики волновых функций поверхностных состояний показаны на рис. 184, заимствованном из обзорной статьи М. С. Хайкина. Сравнение формул (6.78) и (6.69)

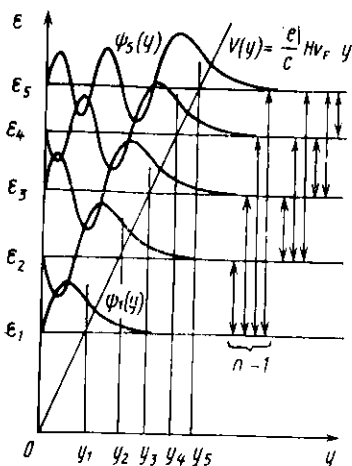


Рис. 184

показывает, что квазиклассическое выражение для ϵ_n совпадает с точным при значении фазовой постоянной γ для квантования Бора — Зоммерфельда, равной $-1/4$.

Заметим, что формула (6.70) для частот линий резонансного поглощения и испускания, подобно формуле Бальмера для спектра атома водорода, описывает спектр, линии которого образуют серии, различающиеся квантовым числом k (рис. 184). Все линии серии можно получить из (6.78), полагая $n = k+1, k+2, \dots$. При фиксированной частоте переходов ω серии представляют собой последовательность резонансных значений магнитного поля (6.71). Нетрудно заметить, что на шкале магнитных полей каждая следующая серия начи-

нается при большем значении поля H , чем предыдущая, а все линии серии отсчитываются в сторону меньшего поля. Формула (6.71) позволяет получать сколь угодно большие значения резонансных полей. На самом деле эффективными будут только те орбиты, которые находятся в пределах спин-слоя на данной частоте электромагнитного поля. Этим орбитам соот-

ветствуют сравнительно небольшие числа n и k . В эксперименте удается наблюдать отчетливые резонансы, соответствующие переходам между уровнями n , $k \leq 6-8$.

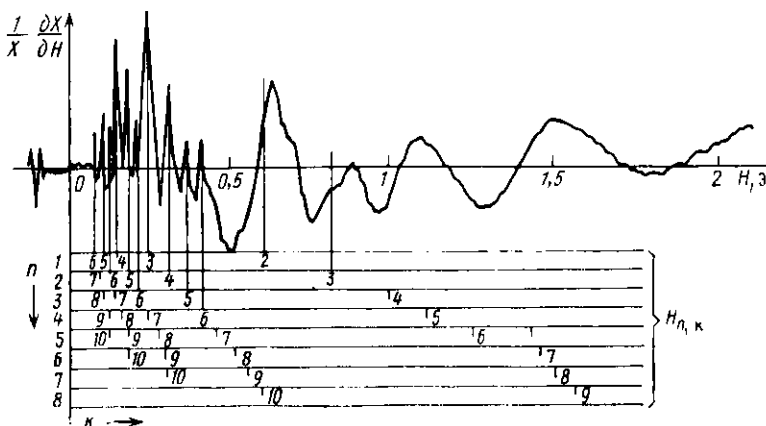


Рис. 185

На рис. 185 приведены осцилляции мнимой части поверхностного импеданса $Z_{\text{пов}} = R + iX$ у висмута на частоте $\nu = \omega/2\pi = 9,7$ ГГц в полях до 2 Э. В нижней части рисунка приведены расчетные положения нескольких серий резонансных линий спектра $H_{n,k}$ магнитных поверхностных уровней. В области полей $H < 0,5$ Э наблюдается идеальное совпадение большого числа экспериментальных пиков с расчетными значениями полей $H_{n,k}$, вычисленными по формуле (6.71) при $\gamma = -1/4$ и подходящей величине параметра p_F/v_F^3 .

При больших числах n и k резонансы, по-видимому, начинают сливаться, так как разность соседних значений $\hbar\omega_{n,k}$ становится меньше неопределенности $\hbar/\tau$ энергии электронов. Кроме того, в полях $H > 0,5$ Э возникают дополнительные особенности поверхностного импеданса, которые могут быть объяснены другими эффектами.

Интересно отметить, что электроны, движущиеся по скачущим траекториям, могут быть не только в нормальном металле, но и в сверхпроводнике, находящемся в слабом магнитном поле, меньшем его критической величины. В этом случае по скачущим траекториям вдоль поверхности сверхпроводника движется часть имеющих в нем нормальных электронов. Скачущие траектории формируются под действием постоянного магнитного поля, проникающего в сверхпроводник по закону $H(y) = H_0 e^{-y/\lambda_L}$, где λ_L — лондоновская глубина проникновения поля. Вследствие неоднородности поля траектории не являются дугами окружности, а сильно вытянуты вдоль поверхности, причем малое изменение глу-

бины залегания траектории приводит к ее резкому удлинению. Это явление приводит к возникновению поверхностного уровня в сверхпроводнике. Действительно, осцилляции электронов на скачущих траекториях в направлении нормали к поверхности сверхпроводника эквивалентны одномерному движению в потенциальной яме, ограниченной потенциалами $V=\infty$ на поверхности и зависящим от глубины y потенциалом $V(y)=-\frac{|e|\hbar}{c}v_F\lambda_L H e^{-y/\lambda_L}$. В такой яме помещается лишь один магнитный поверхностный уровень, лежащий на глубине $\epsilon_1 \cong \frac{|e|\hbar}{c}v_F\lambda_L H$ под нижней границей континуума

нормальных состояний энергетического спектра электронов в сверхпроводнике. Если облучать сверхпроводник электромагнитными квантами с энергией $\hbar\nu$, меньшей энергии связи куперовских пар, то максимум поглощения будет наблюдаться при $\hbar\nu=\epsilon_1$ в результате резонансных переходов электронов с уровня ϵ_1 в область спектра свободных состояний, обладающего максимальной плотностью уровней на границе. Резонансное поглощение электромагнитной энергии в сверхпроводнике, находящемся в слабом магнитном поле, экспериментально наблюдалось в алюминии, олове и индии ниже температуры соответствующего сверхпроводящего перехода. Указанное явление демонстрирует хорошее качественное и количественное согласие данных эксперимента с теорией.

Характерно, что возбуждение магнитного поверхностного уровня наблюдалось в находящихся в сверхпроводящем состоянии металлах, поверхности Ферми которых имеют близкие к цилиндрическим участки, т. е. в металлах, у которых и в нормальном состоянии наблюдался эффект образования магнитных поверхностных уровней.

В заключение отметим, что электроны, движущиеся по скачущим траекториям в металле, создают слоистый поверхностный ток, магнитный момент которого направлен параллельно внешнему магнитному полю. Вследствие этого в приповерхностном слое металла возникает парамагнетизм, характерный для слабого магнитного поля, который проявляется в нарушении обычной линейной зависимости от поля магнитного момента металла. Этот парамагнетизм должен обладать анизотропией, связанной с формой поверхности Ферми и особенно существенной для ее цилиндрических частей.

§ 6. МАГНИТНЫЙ ПРОБОЙ

В § 2 гл. 3 было показано, что в квазиклассическом приближении форма траектории электронов в магнитном поле полностью определяется соответствующим сечением поверхности Ферми плоскостью $p_{||}=\text{const}$. Однако, если при некоторых сечениях поверхности Ферми траектории электронов располагаются достаточно близко друг к другу, становятся возможными переходы электрона с одной орбиты на другую, в результате чего первоначальная фор-

ма траектории изменяется. Это явление, имеющее квантовую природу, получило название магнитного пробоя.

Известны два типа магнитного пробоя: внутризонный, при котором электрон переходит с одной орбиты на другую в пределах одной энергетической зоны, и межзонный, при котором электрон переходит с траектории, расположенной в одной зоне, на траекторию в другой зоне. Рассмотрим эти два случая отдельно.

Внутризонный магнитный пробой происходит в том случае, когда имеются близкорасположенные траектории, принадлежащие одной и той же изоэнергетической поверхности. Одним из характерных примеров поверхностей, на которых реализуется подобная ситуация, является поверхность с седловыми точками. Простейшим представителем такой поверхности является гантелеобразная поверхность (рис. 126). В магнитном поле, перпендикулярном оси гантели (например, при $\mathbf{H} \parallel p_z$) существуют орбиты трех типов: гантелеобразные при $|p_z| < OA$, орбиты с самопересечением при $|p_z| = OA$ и орбиты, состоящие из двух замкнутых кривых при $O'B > |p_z| > OA$ (см. рис. 186, а (1, 2, 3)). Соответствующие им траектории в координатном пространстве показаны на рис. 186, б.

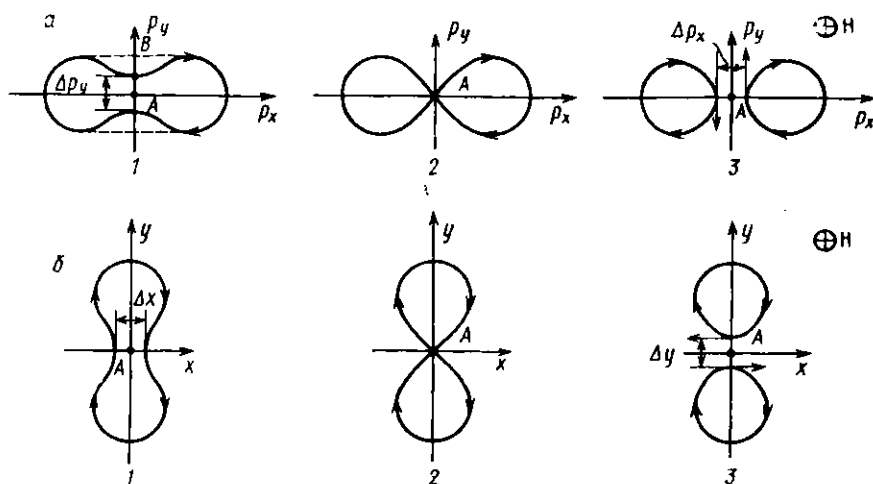


Рис. 186

Напомним, что параметры орбит в p -пространстве не зависят от напряженности магнитного поля; при увеличении H возрастает только частота $\omega_c = \frac{|e|\hbar}{m_e c}$ обращения изображающей точки на орбите. В координатном пространстве размеры орбит, а в том случае, когда орбиты принадлежат одному сечению изоэнергетической поверхности, и расстояния между ними уменьшаются обратно пропорционально H , так как при переходе от p -простран-

ства к g -пространству происходит изменение масштаба в $c/|e|H$ раз. Поэтому при увеличении магнитного поля ширина Δy перемычки на рис. 186,б (1) и расстояние Δx между орбитами на рис. 186,б (3) уменьшается как $1/H$. В магнитных полях $H=H_n$, при которых величина Δx или Δy становится сравнимой с величиной δx , δy неопределенности в положении электрона на орбите, появляется конечная вероятность w «перехода» электрона с одной орбиты на другую. Так, для траектории, показанной на рис. 186,а (1) переход такого типа соответствует «замыканию» перемычки в узком месте орбиты. Для траектории, показанной на рис. 186,а (3), при таком переходе электроны уходят со своей орбиты на соседнюю.

Внутризонный магнитный пробой обладает рядом особенностей. Прежде всего обратим внимание на то, что скорость электрона при движении по орбите с самопересечением (рис. 186,а (2)) уменьшается по мере приближения к седловой точке и в самой точке A обращается в нуль. Действительно, в седловой точке нормаль к изоэнергетической поверхности направлена ортогонально плоскости орбиты. При этом проекция фермиевской скорости на плоскости орбиты в точке A обращается в нуль. При удалении от седловой точки нормаль к поверхности все более и более отклоняется от направления магнитного поля ($H \parallel p_z$), в результате чего величина проекции скорости на плоскость орбиты возрастает. Аналогичный характер движения электрона наблюдается и по орбитам на рис. 186,а (1) и (2) с той лишь разницей, что вблизи точки A скорость электрона не обращается в нуль: по мере приближения к точке A скорость сильно уменьшается. Чем меньше Δr_x или Δr_y на рис. 186,а (1) и (2), тем меньше скорость электрона на участке траектории вблизи точки A . В результате этого внутризонный магнитный пробой осуществляется практически при нулевой скорости электронов.

Другой особенностью внутризонного магнитного пробоя является то, что при пробое направление скорости электрона всегда изменяется на противоположное (см. рис. 186,б (1) и (3)). Так, при пробое траектории типа (1) на рис. 186,б электрон, двигаясь снизу вверх по левой стороне кривой, вблизи точки A с определенной вероятностью (зависящей от величины поля) переходит на правую сторону и продолжает двигаться по ней в направлении часовой стрелки. Аналогично электрон,двигающийся сверху вниз по правой стороне кривой, вблизи точки A может перейти на левую сторону и двигаться по ней снизу вверх. В результате в режиме магнитного пробоя электроны двигаются по траекториям, окружающим вдвое меньшую площадь. Точно так же в режиме магнитного пробоя между траекториями типа (3) на рис. 186,б электрон, движущийся по нижней замкнутой кривой, вблизи точки A переходит на верхнюю кривую и, сделав по ней один оборот, снова может перейти вблизи точки A на нижнюю кривую. В этом случае результирующая орбита электрона имеет вдвое большую площадь. Заметная вероятность пробоя появляется при условии,

что Δx (или Δy) становятся близки к δx (или δy). При дальнейшем увеличении поля Δx (или Δy) становятся меньше неопределенности δx (или δy) положения электрона на орбите и вероятность пробоя увеличивается. В предельно сильных магнитных полях вероятность перехода с одной траектории на другую при внутризонном магнитном пробое сравнивается с вероятностью движения электрона по исходной траектории, соответствующей слабым магнитным полям $H \ll H_n$. Поэтому в достаточно сильных магнитных полях при пробое траекторий типа (1) на рис. 186,б одновременно существуют траектории типа (1) и типа (3). Такие же два типа траекторий одновременно существуют и при пробое траекторий типа (3) на рис. 186,б. Таким образом, максимальная вероятность ω внутризонного магнитного пробоя при $H \rightarrow \infty$ равна $1/2$. Величина ω в произвольном магнитном поле определяется формулой Блаунта:

$$\omega = \frac{1}{2} e^{-H/H_n}. \quad (6.79)$$

Определим значение параметра H_n в (6.79), который определяет характерную величину магнитного поля, при котором начинает наблюдаться магнитный пробой. Для определенности рассмотрим конкретный случай пробоя между траекториями типа (3) на рис. 186,б.

Минимальное расстояние Δx между соседними траекториями (3) на рис. 186,б связано с расстоянием Δp_y в импульсном пространстве на рис. 186,а (3) соотношением

$$\Delta x = \frac{c \Delta p_y}{|e| \cdot H}.$$

Неопределенность δx положения электрона на орбите в координатном пространстве также связана с неопределенностью δp_y положения изображающей точки в импульсном пространстве $\delta x \gtrsim \hbar / \delta p_y$. Приравнявая Δx и δx друг к другу при $H = H_n$, получим

$$\frac{c \Delta p_y}{|e| H_n} \sim \frac{\hbar}{\delta p_y},$$

откуда

$$H_n \sim \frac{c \Delta p_y \delta p_y}{|e| \hbar}. \quad (6.80)$$

Поскольку энергия электрона в точке A' больше, чем энергия в точке A , ближайшие друг к другу точки орбит на рис. 186,б (3) разделены между собой потенциальным барьером, величина $\Delta \epsilon$ которого при малых значениях Δp_y равна $\Delta \epsilon = \epsilon_{A'} - \epsilon_A \simeq \frac{1}{2} \cdot$

$\left(\frac{\Delta p_y}{2} \right)^2 \cdot \frac{1}{m_{yy}^*}$, где $m_{yy}^* = \left(\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_y^2} \right)^{-1}$ при $p_x = p_y = 0$; $p_z = OA$ (см. рис. 126) компонента тензора эффективной массы, вычисленная в

точке А. При пробое расстояние Δp_y между орбитами в импульсном пространстве (см. рис. 192, а (3)) по порядку величины сравнивается с неопределенностью δp_y импульса электрона. Поэтому, полагая в (6.80) $\Delta p_y \cdot \delta p_y \sim (\Delta p_y)^2 \simeq 8m_{yy}^* \Delta \epsilon$, получим для величины поля пробоя

$$H_{\Pi} \simeq 8 \frac{\Delta \epsilon}{\left(\frac{|e|\hbar}{m_{yy}^* c} \right)}. \quad (6.81)$$

В формуле (6.81) знаменатель имеет размерность магнетона Бора $\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_0 c}$.

Механизм мезонного магнитного пробоя отличается от механизма внутризонного. При межзонном пробое электрон, двигаясь с фермиевской скоростью по орбите, расположенный в одной зоне, туннелирует через энергетическую щель (потенциальный барьер) между зонами и переходит на траекторию в другой зоне. Направление скорости электрона при межзонном пробое всегда сохраняется.

Основные особенности межзонного магнитного пробоя проиллюстрируем на примере одновалентного металла, элементарная ячейка решетки которого имеет форму прямоугольного параллелепипеда, вытянутого вдоль одной из осей. Для определенности будем считать, что направление максимального периода b в решетке металла совпадает с осью y , а направления равных между собой минимальных периодов a — осями x и z . Энергетический спектр такого металла рассмотрен в § 2 гл. 2. Элементарная ячейка решетки и первая зона Бриллюэна изображены на рис. 109 и 111 соответственно.

Напомним, что в рассматриваемом случае при выполнении неравенства $\frac{a}{b} < \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \simeq 0,98$ радиус r_F сферы Харрисона удовлетворяет условию $\frac{\pi \hbar}{b} < r_F < \frac{\pi \hbar}{a}$ и сфера Харрисона пересекает грани зоны Бриллюэна, перпендикулярные оси p_y , но не достигает остальных четырех граней. Будем считать это неравенство выполненным. Поверхность Ферми рассматриваемого металла в этом случае состоит из двух изоэнергетических поверхностей: гофрированного цилиндра в 1-й зоне и чечевицеобразных электронных поверхностей — во 2-й. Направление открытости гофрированного цилиндра совпадает с осью p_y . Сечения поверхности Ферми в первой и второй зонах плоскостью $p_z = 0$ изображены на рис. 187. Траектории электронов в плоскости $p_z = 0$ с учетом конечного псевдопотенциала показаны на рис. 187, а. На рис. 187, б изображены соответствующие траектории в координатном пространстве. Стрелками показано направление движения электронов в магнитном поле, направленном вдоль оси z .

При увеличении магнитного поля H масштаб в координатном пространстве уменьшается в $|e|\hbar/c$ раз, так что размеры всех

электронных траекторий в кристалле уменьшаются пропорционально $1/H$. Аналогично уменьшаются и расстояния между траекториями в различных зонах. В частности, интервал Δy между точками D и C на рис. 187, б выражается через интервал Δp_x между соответствующими точками D и C в импульсном пространстве на рис. 187, а.

$$\Delta y = \frac{c \Delta p_x}{|e| H}. \quad (6.82)$$

Величина $\Delta \epsilon$ потенциального барьера между точками C и D на рис. 187, а равна величине энергетической щели между зонами и совпадает с удвоенной величиной матричного элемента эффектив-

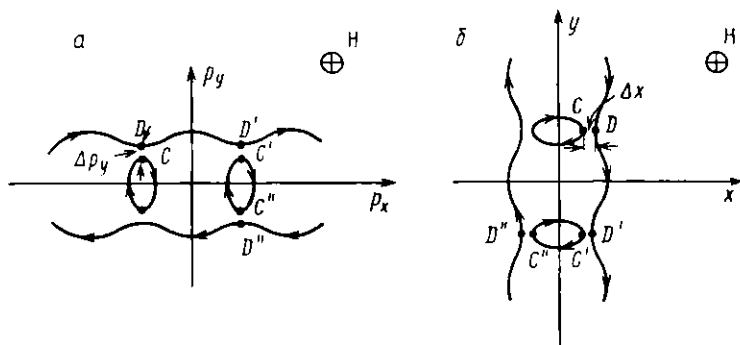


Рис. 187

ного потенциала $\Delta \epsilon = 2|V_{\text{эф}}|$. С ростом магнитного поля уменьшается ширина потенциального барьера Δy , при этом возрастают его прозрачность и вероятность ω туннелирования электронов через барьер.

Из квантовой механики известно, что волновая функция электрона в кристалле, падающего на потенциальный барьер со скоростью v_F и имеющего энергию $\epsilon_F \simeq m^* v_F^2 / 2$, затухает по экспоненциальному закону. Расстояние, на котором амплитуда волновой функции уменьшается в e раз (длина затухания), пропорциональна $a \cdot \frac{\epsilon_F}{\Delta \epsilon}$, где a — параметр решетки. Для того чтобы возник межзонный пробой, необходимо, чтобы расстояние Δx между траекториями стало равно длине затухания волновой функции в запрещенной области. Таким образом, поле H_p межзонного пробоя определяется из условия

$$\Delta x \sim a \frac{\epsilon_F}{\Delta \epsilon}.$$

Подставляя значение Δx , находим

$$\frac{\Delta p_y}{\frac{|e|\hbar}{c} H_{\pi}} \sim a \frac{\epsilon_F}{\Delta \epsilon}. \quad (6.83)$$

Для квадратичного закона дисперсии $\epsilon = p^2/2m^*$ различие энергии в точках C и D (рис. 186, a)

$$\Delta \epsilon = \epsilon_D - \epsilon_C = \frac{p_1^2}{2m^*} - \frac{p_2^2}{2m^*}.$$

Так как

$$|p_1| \simeq |p| + |\Delta p_y| \text{ и } |\Delta p_y| \ll |p|,$$

$$\Delta \epsilon \simeq \frac{p \Delta p_y}{m^*}, \text{ откуда } \Delta p_y \simeq \frac{\Delta \epsilon \cdot m^*}{p}.$$

Подставляя Δp_y в (6.83), получаем

$$H_{\pi} \sim \frac{(\Delta \epsilon)^2 m^* c}{\epsilon_F p \cdot a |e|}. \quad (6.84)$$

Значение импульса p порядка размера зоны Бриллюэна $p \sim \frac{\hbar}{a}$, так что $pa \sim \hbar$. Таким образом, поле H_{π} , при котором возникает межзонный пробой, описывается выражением

$$H_{\pi} \sim \frac{(\Delta \epsilon)^2}{\mu_B \cdot \epsilon_F}.$$

Видно, что межзонный пробой наступает при многих меньших (в $\Delta \epsilon/\epsilon_F$ раз) значениях магнитного поля, чем внутризонный.

Как уже отмечалось, при увеличении магнитного поля ширина Δx потенциального барьера уменьшается и при $H \rightarrow \infty$ стремится к нулю. В связи с этим прозрачность барьера стремится к бесконечности, а вероятность ω пробоя — к единице.

Межзонный магнитный пробой качественно изменяет движение электронов в магнитном поле. Для случая, представленного на рис. 186, b , в очень сильных полях, когда вероятность пробоя $\omega \sim 1$, электрон, двигаясь по левой открытой траектории снизу вверх, переходит в точке D на внутреннюю замкнутую траекторию, двигается по ней слева направо от точки C к C' , затем переходит на правую траекторию, двигается по ней вниз до точки D'' , переходит на внутреннюю траекторию и т. д., т. е. описывает окружность, как свободный электрон. Это означает, что вероятность брэгговского отражения, которую мы считали при построении поверхностей Ферми равной единице, в магнитном поле уменьшается и в очень сильных магнитных полях обращается в нуль, т. е. электроны в металлах в магнитном поле двигаются как свободные частицы, не отражаясь от границ зоны Бриллюэна. Причину этого явления можно пояснить следующим образом. При увели-

чении напряженности магнитного поля радиус кривизны орбиты электрона уменьшается. Соответственно уменьшается эффективное число кристаллических плоскостей, от которых электрон отражается при прямолинейном движении без магнитного поля (траектория электрона сильно искривлена и на квазипрямолинейном участке траектории находится ограниченное число отражающих плоскостей). Малое число отражающих плоскостей при условии малой величины эффективного рассеивающего потенциала создает очень слабый потенциальный барьер, который оказывается прозрачным для фермиевских электронов. Поэтому в предельно сильных магнитных полях зонная структура спектра исчезает и электроны двигаются в металле по окружностям, соответствующим неискаженной сфере Гаррисона. Однако напряженность магнитного поля, при которой может реализоваться такая ситуация, должна составлять 10^7 — 10^8 эрстеда, что существенно превышает достижимые в настоящее время поля.

При анализе влияния межзонного пробоя на зависимости поперечного электрического сопротивления металлов от магнитного поля надо иметь в виду следующее.

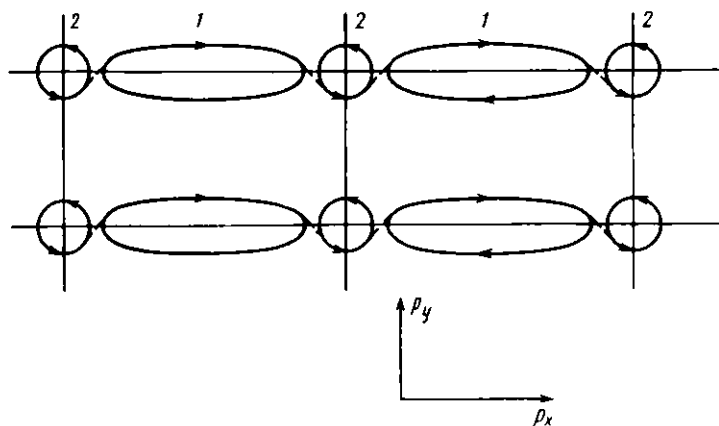


Рис. 188

Во-первых, межзонный пробой в реально достижимых полях может приводить как к переходу электронов с открытых орбит на закрытые (рис. 186, б), так и к образованию открытых траекторий при тех направлениях магнитного поля, при которых в слабых полях они отсутствовали (рис. 188). В качестве примера рассмотрим цепочки чередующихся в направлении оси p_x электронных (1) и дырочных (2) изоэнергетических поверхностей, сечение которых плоскостью $p_z=0$ показано на рис. 188. Открытые траектории образуются при последовательных переходах электронов с электронных на дырочные поверхности и с дырочных — на элект-

ронные. Возникающие при этом открытые траектории изображены на рис. 188 пунктиром.

Во-вторых, мы рассматривали только экстремальные сечения изоэнергетических поверхностей, для которых расстояния Δr между ними и расстояния Δx , Δy между соответствующими траекториями в кристалле — минимальны. Очевидно, расстояния между аналогичными орбитами для неэкстремальных сечений могут быть значительно больше и для того, чтобы между ними произошел пробой, необходимы существенно большие магнитные поля. Поэтому при увеличении магнитного поля выше значения H_{Π} происходят два процесса: увеличивается вероятность ω пробоя

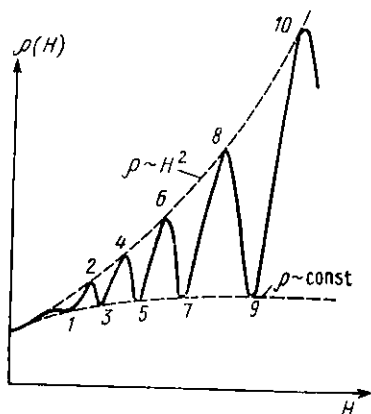


Рис. 189

для экстремальных орбит и одновременно увеличивается число орбит между которыми начинается магнитный пробой, т. е. в пробой втягивается все большее и большее число электронов.

В-третьих, при увеличении магнитного поля могут начать «пробиваться» другие, более широкие перемычки.

Поэтому общая картина магнитного пробоя у многовалентных металлов может быть очень сложной.

Если, например, у металла с равными объемами электронных и дырочных изоэнергетических поверхностей ($n_e = n_h$) в результате магнитного пробоя возникают открытые траектории в направлении

электрического поля (в том случае когда в более слабых полях их не было), то зависимость $\rho \sim H^2$ переходит в зависимость $\rho \sim \text{const}$ и при этом сопротивление резко уменьшается. Если, наоборот, у металла с $n_e = n_h$ «пробиваются» открытые траектории, расположенные вдоль электрического поля, то сопротивление начинает возрастать и, когда все открытые траектории перейдут в закрытые, зависимость ρ от H изменится от $\rho \sim \text{const}$ (до пробоя) к $\rho \sim H^2$ (после пробоя).

Остановимся коротко еще на одном интересном явлении, связанном с магнитным пробоем. Это явление проявляется наиболее ярко, когда возникает пробой между большими и малыми по объему изоэнергетическими поверхностями с образованием открытых траекторий, расположенных вдоль электрического поля (см., например, рис. 188) и при пробое сопротивление сильно уменьшается. Дело заключается в том, что у малых поверхностей с малыми значениями эффективной циклотронной массы m_c квантование энергии начинается в достаточно слабых магнитных полях. При квантовании образуются квантовые трубки, расстояние между которыми увеличивается при увеличении поля. Когда верхняя (со-

ответствующая наибольшей энергии) трубка проходит через уровень Ферми, электроны с нее переходят на соседнюю внутреннюю трубку с меньшей на $\hbar\omega_c$ энергией. Затем картина повторяется. Это приводит к осцилляциям зазора $\Delta\rho$ между большой изоэнергетической поверхностью (у которой квантовые эффекты начинают проявляться при значительно более сильных полях) и внешними квантовыми трубками, заселенными электронами, у малой поверхности. Соответственно осциллирует расстояние Δx между траекториями электронов в кристалле и, следовательно, ширина потенциального барьера (щели) между зонами. В результате в магнитном поле периодически изменяются вероятность w межзонного пробоя и число электронов, переходящих с закрытых на открытые траектории. Но всякое увеличение числа электронов, движущихся по открытым траекториям вдоль электрического поля (тока), очень сильно уменьшает электрическое сопротивление металла, а уменьшение таких электронов, наоборот, увеличивает. Осцилляции w приводят к гигантским (по амплитуде) осцилляциям магнетосопротивления у металла в магнитном поле, возникновение которых поясняется рис. 189. В точках 1, 3, 5, 7 и т. д. вероятность пробоя w достигает локальных максимумов, а в точках 2, 4, 6 и т. д. — минимумов.

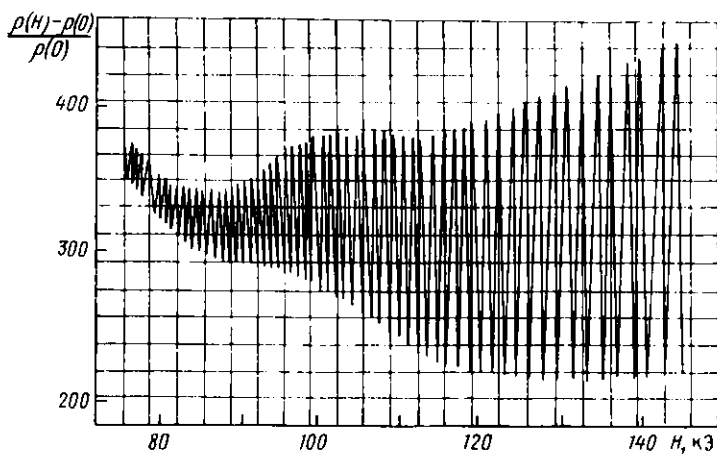


Рис. 190

На рис. 190 в качестве примера показаны магнитопробойные осцилляции электрического сопротивления, наблюдаемые у цинка.

Глава 7

ФАЗОВЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

§ 1. ДВУХЗОННЫЙ МЕТАЛЛ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Назовем двухзонный такой металл, в котором существование свободных носителей тока (электронов и дырок) обязано перекрытию двух зон — зоны проводимости и валентной зоны. Подобная ситуация может возникнуть в веществе, состоящем из атомов с четной валентностью, в котором валентные электроны заполняют целое число зон Бриллюэна. Напомним, что при этом металл возникает в случае, когда максимум энергии в нижней из зон, которая может быть целиком заполнена электронами, расположен выше минимума энергии в последующей пустой зоне. При таких условиях энергетически выгодным является частичное заполнение электронами пустой зоны вблизи минимума энергии, в результате чего в нижней зоне появляется равное им число вакантных мест (дырок).

Рассмотрение двухзонного металла начнем с простейшего случая изотропного квадратичного спектра у электронов и дырок. Такое приближение является достаточным, чтобы выяснить основные особенности поведения двухзонного металла в магнитном поле. Для определенности будем рассматривать двухвалентный металл, в котором имеется перекрытие между первой и второй энергетическими зонами. Концентрация электронов n_e во 2-й зоне равна концентрации дырок n_h в первой.

Поместим для удобства начало координат $\mathbf{p}$ -пространства в точку минимума энергии во второй зоне (в зоне проводимости). Закон дисперсии электронов записывается в виде

$$\mathcal{E} - \mathcal{E}_c = p^2/2m_e^*, \quad (7.1)$$

где $\mathcal{E}_c$ — уровень энергии, соответствующий дну зоны проводимости, а m_e^* — изотропная эффективная масса электронов. Пусть максимум энергии в первой зоне (в валентной зоне) смещен относительно начала координат на вектор $\mathbf{G}$. Закон дисперсии дырок имеет вид

$$\mathcal{E}_v - \mathcal{E} = \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{G})^2}{2m_h^*}, \quad (7.2)$$

где $\mathcal{E}_v$ — уровень энергии, соответствующий потолку валентной зоны, m_h^* — абсолютное значение изотропной эффективной массы дырок.

Распределение электронов между зонами происходит так же, как распределение жидкости в сообщающихся сосудах. Уровень Ферми, определяющий границу заполнения, должен быть одним и тем же в каждой зоне. Диаграмма, условно изображающая

энергетический спектр двухзонного металла, показана на рис. 191. Здесь штриховкой обозначена область занятых состояний ниже уровня Ферми. Сумма энергий Ферми электронов ϵ_F^e и дырок ϵ_F^h составляет энергию перекрытия зон ϵ_π . Значение энергии Ферми в каждой зоне определяется из условия равенства концентраций электронов n_e и дырок n_h .

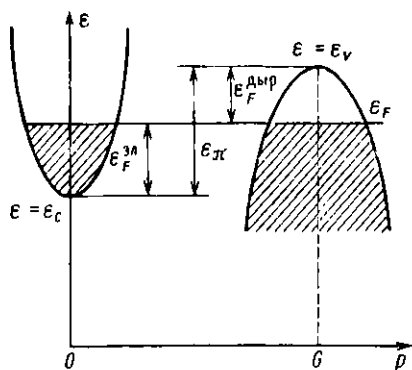


Рис. 191

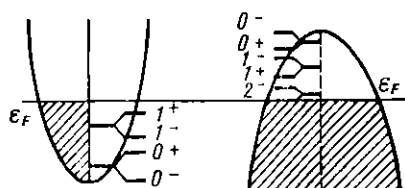


Рис. 192

Концентрации носителей тока в отсутствие магнитного поля имеют вид

$$n_e = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2\hbar^3} (m_e^* \epsilon_F^e)^{3/2}, \quad n_h = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2\hbar^3} (m_h^* \epsilon_F^h)^{3/2}. \quad (7.3)$$

Приравнявая $n_e = n_h$, найдем

$$\frac{\epsilon_F^e}{\epsilon_F^h} = \frac{m_h^*}{m_e^*}. \quad (7.4)$$

Или, выражая ϵ_F^e и ϵ_F^h через ϵ_π ,

$$\epsilon_F^e = \frac{m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \epsilon_\pi; \quad \epsilon_F^h = \frac{m_e^*}{m_e^* + m_h^*} \epsilon_\pi. \quad (7.5)$$

Поместим металл в магнитное поле. В результате квантования энергии носителей образуются системы уровней Ландау для электронов и дырок. Соответствующая им энергетическая диаграмма уровней условно изображена на рис. 192. При увеличении магнитного поля электронные и дырочные уровни Ландау проходят через уровень Ферми, вызывая осцилляции плотности состояний.

Механизм, который приводит к особенностям плотности состояний на уровне Ферми для каждой группы носителей, совершенно

тождествен аналогичному механизму в однозонном металле, описанному в предыдущих параграфах. Вследствие этого в двухзонном металле, помещенном в магнитное поле H , также осциллируют все термодинамические и кинетические характеристики, зависящие от числа носителей на уровне Ферми. Однако в двухзонном металле появляется новая качественная особенность, связанная с наличием двух групп носителей тока разного типа. Здесь речь идет об изменении концентрации электронов n_e и дырок n_h под действием магнитного поля.

Такая особенность отсутствует в однозонном металле, поскольку полное число занятых электронных состояний во всех зонах в магнитном поле не меняется. В случае двух перекрывающихся зон квантование энергии носителей в магнитном поле может приводить к перераспределению занятых электронных состояний между зонами при сохранении, естественно, равновесия между ними, которое выражается равенством $n_e = n_h$.

Зависимость концентрации электронов и дырок в двухзонном металле от магнитного поля связана с двумя различными причинами. Рассмотрим их в отдельности.

I. Первой причиной является изменение энергии перекрытия зон под действием магнитного поля. Оно непосредственно определяется соотношением между спиновым и орбитальным расщеплением для электронов и дырок, поэтому для дальнейшего анализа необходимо ввести спиновые массы электронов m_e^s и дырок m_h^s .

Предположим вначале, что $m_e^s > m_e^*$ и $m_h^s > m_h^*$, т. е. спиновые расщепления у электронов и дырок меньше соответствующих орбитальных расщеплений. Минимальная энергия электронов в магнитном поле определяется не уровнем энергии, соответствующим дну зоны проводимости при $H=0$, а дном параболы Ландау 0^- .

Эта энергия $\Delta\epsilon_e$, отсчитанная от уровня $\epsilon = \epsilon_c$, равна

$$\Delta\epsilon_e = \frac{|e|\hbar H}{2c} A_e,$$

где

$$A_e = \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_e^s} \right). \quad (7.6)$$

Вследствие того что ниже уровня 0^- электронов нет, дно зоны проводимости в магнитном поле совпадает не с уровнем $\epsilon = \epsilon_c$, а с уровнем Ландау 0^- . Из рис. 193 видно, что в случае $m_e^s > m_e^*$ дно зоны проводимости с ростом магнитного поля движется вверх по энергии. Поскольку изменения в системе определяются смещениями различных уровней друг относительно друга, рассмотрим движение потолка валентной зоны для дырок.

Максимальная энергия в валентной зоне равна энергии на вершине параболы 0^- ($n=0$; $s=-1$). Эта энергия $\Delta\epsilon_h$, отсчитанная

от уровня $\epsilon = \epsilon_v$, соответствующего потолку валентной зоны при $H=0$, составляет

$$\Delta\epsilon_h = \frac{|e|\hbar H}{2c} A_h,$$

где

$$A_h = \left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_h^s} \right). \quad (7.7)$$

Выше уровня Ландау 0^+ в магнитном поле дырок нет. Таким образом, потолок валентной зоны в магнитном поле совпадает с уровнем 0^+ . В случае $m_h^s > m_h^*$ с ростом магнитного поля наблюдается движение вниз уровня 0^+ по шкале энергии.

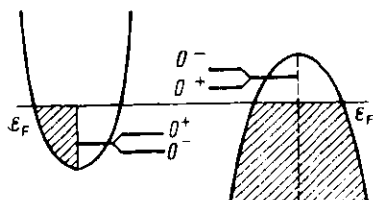


Рис. 193

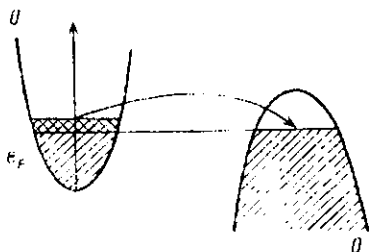


Рис. 194

Энергия перекрытия зон ϵ_π , равная энергетическому расстоянию между потолком валентной зоны и дном зоны проводимости, в магнитном поле может быть записана

$$\epsilon_\pi(H) = \epsilon_\pi^0 - \Delta\epsilon_\pi. \quad (7.8)$$

Здесь ϵ_π^0 — энергия перекрытия при $H=0$, а величина $\Delta\epsilon_\pi$ представляет собой изменение энергии перекрытия в магнитном поле и равна

$$\Delta\epsilon_\pi = \Delta\epsilon_e + \Delta\epsilon_h = \frac{|e|\hbar H}{2c} \cdot B, \quad (7.9)$$

где

$$B = A_e + A_h = \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_e^s} + \frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_h^s} \right).$$

Если величина B положительна, то перекрытие зон в магнитном поле уменьшается. Зона проводимости при этом поднимается по отношению к валентной зоне. Этот процесс при неизменном заполнении зон привел бы к тому, что граница заполнения (уровень Ферми) в зоне проводимости превысила бы границу заполнения в валентной зоне. На самом деле граница заполнения в обеих зонах остается на одном и том же уровне, а движение зон

вызывает перетекание избыточных электронов из зоны проводимости в валентную зону (рис. 194).

Уменьшение перекрытия зон в магнитном поле должно привести к тому, что при некотором значении $H=H_k$ энергия перекрытия $\epsilon_\pi(H)$ должна обратиться в нуль. При этом дно параболы для электронов совпадает с потолком параболы 0^- для дырок (рис. 195).

Значение $H=H_k$ определяется из условия $\epsilon_\pi(H_k)=0$ или $\Delta\epsilon_\pi=\epsilon_\pi^0$ и составляет

$$H_k = \frac{2c\epsilon_\pi^0}{|e|\hbar B}. \quad (7.10)$$

При дальнейшем увеличении магнитного поля дно параболы 0^- для электронов оказывается выше по энергии, чем потолок параболы 0^- для дырок; в энергетическом спектре возникает интервал запрещенных энергий ϵ_g , называемый энергетической щелью (см. рис. 195). Таким образом, при $H=H_k$ происходит переход из металлического состояния в полупроводниковое (диэлектрическое при $T=0$ K), в котором для создания носителей тока (пары из электрона и дырки) необходимо затратить энергию, равную ϵ_g .

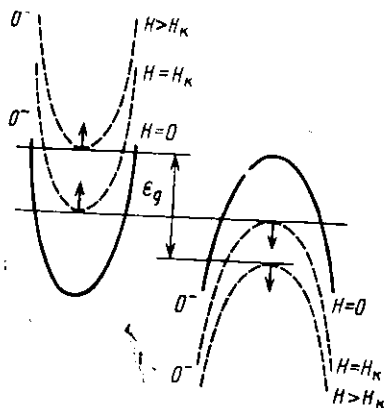


Рис. 195

Изменение состояния при $H=H_k$ представляет собой переход металла — диэлектрик, индуцированный магнитным полем. Переход имеет место при $B>0$, когда в исходном металле наблюдается уменьшение перекрытия зон под действием магнитного поля. Монотонное уменьшение

до нуля перекрытия зон в магнитном поле при $B>0$ может иметь место, если не происходит качественной перестройки одночастичного электронного спектра металла и он остается устойчивым до сколь угодно малых значений энергии перекрытия зон.

Однако при определенных условиях в области перехода металл — диэлектрик одночастичный спектр может стать неустойчивым относительно образования электронно-дырочных пар — экситонов. В этом случае возникает новое состояние вещества, получившее название экситонного диэлектрика. Сильное внешнее магнитное поле не является единственным физическим параметром, изменение которого способно индуцировать переходы металл — диэлектрик или обратные. Подобные переходы также происходят, например, при изменении внешнего давления на кристалл, при котором меняются величины межатомных расстояний,

при изменении температуры и т. д. В принципе образование экситонного диэлектрика при определенных условиях возможно вблизи точки перехода металл — диэлектрик, индуцированного изменением различных физических параметров. Этот вопрос был теоретически рассмотрен в работах Н. Мотта, Л. В. Келдыша, Ю. В. Копеева и в настоящее время детально исследован. Однако образование экситонного диэлектрика до сих пор экспериментально наблюдалось только в веществе с сильно анизотропным спектром электронов в области перехода металл — диэлектрик, индуцированного сильным магнитным полем. Дело в том, что возникновение экситонной фазы требует выполнения ряда жестких требований, которым очень трудно удовлетворить в реальных условиях. Эти требования значительно упрощаются в сильном магнитном поле.

Перейдем теперь к анализу характера смещения границ зон в магнитном поле в случае, когда спиновое расщепление уровней Ландау превосходит их орбитальное расщепление: $m_e^s < m_e^*$. Положение уровней 0^- для электронов и дырок при этом показано на рис. 196. Видно, что дно зоны проводимости (уровень 0^-) понижается на величину $-\frac{|e|\hbar H}{2c} \left(\frac{1}{m_e^s} - \frac{1}{m_e^*} \right)$

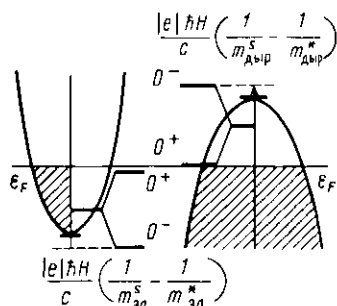


Рис. 196

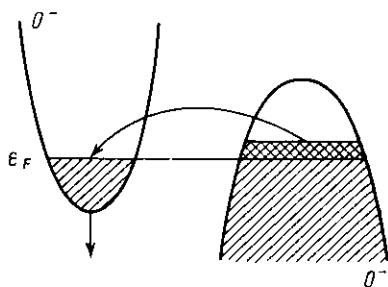


Рис. 197

относительно уровня $\mathcal{E} = \mathcal{E}_c$, потолок валентной зоны повышается на величину $-\frac{|e|\hbar H}{2c} \left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_h^s} \right)$ относительно уровня $\mathcal{E} = \mathcal{E}_v$.

Следовательно, перекрытие зон в этом случае увеличивается на сумму этих величин.

Увеличение перекрытия зон эквивалентно тому, что зона проводимости в магнитном поле надвигается по энергии на валентную зону. Концентрация электронов n_e и равная ей концентрация дырок n_h при этом растут за счет перетекания избыточных электронов из валентной зоны в зону проводимости (рис. 197). Рост концентрации происходит быстрее, чем это определялось бы од-

ним увеличением перекрытия зон, так как в магнитном поле происходит одновременно возрастание степени вырождения уровней Ландау.

Итак, направление движения дна зоны проводимости в магнитном поле определяется знаком величины A_c в выражении (7.6): при $A_c > 0$ дно зоны смещается вверх, а при $A_c < 0$ — вниз. Абсолютная величина скорости смещения дна зоны в магнитном поле равна

$$\left| \frac{\partial \Delta \epsilon_c}{\partial H} \right| = \frac{|e| \hbar}{2c} |A_c|. \quad (7.11)$$

Точно так же потолок валентной зоны движется вниз по энергии в магнитном поле, если величина A_h в выражении (7.7) положительна, и, наоборот, потолок валентной зоны движется вверх, если величина A_h отрицательна. Абсолютное значение скорости смещения потолка валентной зоны равно

$$\left| \frac{\partial \Delta \epsilon_h}{\partial H} \right| = \frac{|e| \hbar}{2c} |A_h|. \quad (7.12)$$

Относительное движение зон в магнитном поле, в результате чего может наблюдаться увеличение или уменьшение энергии перекрытия ϵ_π , определяется величиной и знаком суммы $\Delta \epsilon_c + \Delta \epsilon_h$, которая в свою очередь зависит от величины и знака B в выражении (7.9).

Уменьшение перекрытия зон в магнитном поле соответствует случаю $B > 0$. При $B < 0$ перекрытие зон в магнитном поле только увеличивается и металлическое состояние сохраняется до сколь угодно больших магнитных полей, при которых еще справедливо используемое представление об электронном энергетическом спектре металла. Электронный спектр металла описывает состояния коллективизированных валентных электронов. Представления о спектре этих состояний применимы до тех пор, пока в магнитном поле не начнется радикальная перестройка энергетических уровней электронов у атомов металла, т. е. до значений полей H^* атомного масштаба, при которых квант циклотронной частоты $\hbar \omega_c$ сравнивается с энергией основного состояния атома (см. ниже § 2). Для оценки H^* воспользуемся формулами для атома водорода:

$$\hbar \omega_c \sim e^2 / r_B = m_0 e^4 / 2 \hbar^2,$$

где r_B — радиус первой боровской орбиты. Отсюда следует, что

$$H^* \sim \frac{m_0^2 e^3 c}{\hbar^3} = 2,3 \cdot 10^9 \text{ Э.}$$

Абсолютное значение скорости изменения перекрытия зон как в том, так и в другом случае равно

$$\left| \frac{\partial \epsilon_\pi}{\partial H} \right| = \frac{|e| \hbar}{2c} |B|. \quad (7.13)$$

Выше были рассмотрены случаи, когда границы зоны проводимости и валентной зоны в магнитном поле смещаются в противоположных направлениях. При этом знаки величин A_e и A_h каждый раз совпадают между собой и со знаком B . Однако могут иметь место и такие случаи, когда знаки A_e и A_h противоположны. Например, спиновое расщепление уровней Ландау для электронов может превосходить орбитальное ($A_e < 0$), а для дырок — быть меньше орбитального ($A_h > 0$). Изменение перекрытия зон в таких случаях по-прежнему определяется величиной B . Границы зон при этом движутся в одном и том же направлении — вверх или вниз, по скорости их движения могут быть разными. При движении вверх, например, дно зоны проводимости может отставать от потолка валентной зоны ($A_e > 0$, $A_h < 0$; $A_e < |A_h|$ и $B < 0$) и, следовательно, перекрытие зон будет увеличиваться ($B < 0$). Если, наоборот, дно зоны проводимости догоняет потолок валентной зоны ($A_e > 0$, $A_h < 0$, $A_e > |A_h|$ и $B > 0$), то перекрытие зон будет уменьшаться и при некотором значении магнитного поля H_k произойдет переход в полупроводниковое состояние. Аналогичное рассмотрение можно провести для движения границ зон вниз.

Таким образом, соотношения между спиновыми и орбитальными массами электронов и дырок (величина B) определяет взаимное расположение зон по энергии при каждом значении магнитного поля. Это расположение остается неизменным только при том условии, если $B=0$. Энергия перекрытия зон ϵ_k при этом не зависит от магнитного поля. Равенство $B=0$ соответствует трем различным возможностям:

- зоны движутся вверх с одинаковой скоростью (A_e и A_h отличны от нуля, но имеют разные знаки, причем $A_e = |A_h|$);
- зоны движутся вниз с одинаковой скоростью (A_e и A_h отличны от нуля, но имеют разные знаки, причем $|A_e| = A_h$);
- зоны неподвижны ($A_e = 0$; $A_h = 0$).

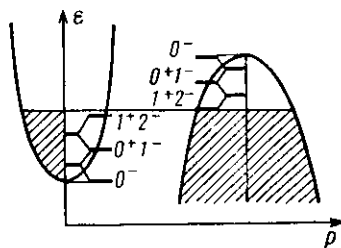


Рис. 198

Остановимся подробнее на последнем случае. Обращение в нуль A_e и A_h означает, что спиновые расщепления уровней Ландау для электронов и дырок равны соответствующим орбитальным расщеплениям. Электронный уровень Ландау 0^- в любых магнитных полях для случая $A_e = 0$ совпадает с дном зоны проводимости при $H=0$. При этом говорят, что уровень 0^- «вморожен» в дно зоны проводимости. Аналогично при $A_h = 0$ дырочный уровень Ландау 0^- «вморожен» в потолок валентной зоны (рис. 198). Такая ситуация интересна тем, что позволяет исключить влияние движения границ зон на изменение концентрации носителей в магнитном поле и выяснить роль других факторов.

II. Второй причиной изменения концентрации носителей в магнитном поле является непрерывный рост степени вырождения уровней Ландау электронов и дырок. При отсутствии движения границ зон эта причина приводит к увеличению концентраций n_e и n_h .

Для выяснения физической стороны этого вопроса упростим задачу, исключив все дополнительные факторы, которые могут изменяться в магнитном поле. Прежде всего исключим влияние движения границ зон, полагая $A_e = A_h = 0$. Далее для простоты предположим, что электронная и дырочная зоны являются подобными, т. е. $m_e^* = m_h^* = m$. В такой системе при отсутствии магнитного поля уровень Ферми расположен точно посередине между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны и $\epsilon_F^e = \epsilon_F^h = \epsilon_F^0 = \frac{\epsilon_\pi}{2}$ (см. выражения (7.4) и (7.5)). Концентрация электронов и дырок при $H=0$ составляют

$$n_e = n_h = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2\hbar^3} (m\epsilon_F^0)^{3/2} = \frac{(m\epsilon_\pi)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}. \quad (7.14)$$

Концентрацию носителей в магнитном поле можно получить, интегрируя по энергии выражение для плотности состояний, в котором учтено спиновое расщепление. Интегрирование каждого члена в сумме проводится от дна соответствующей подзоны Ландау

$$\epsilon = \epsilon_{n,s} = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} g\mu_B H$$

до уровня Ферми $\epsilon = \epsilon_F$. При этом получается выражение для концентрации электронов в виде

$$n_e = \frac{\hbar\omega_c \cdot m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \sum_{s=\pm 1} \sum_{n=0}^{n=n_{\max}(s)} \left[\epsilon_F^e(H) - \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} s\hbar\omega_c \right]^{1/2}, \quad (7.15)$$

где целое число $n_{\max}(s)$ определяется двойным неравенством (6.73). В выражении (6.15) учтено, что $m_e^* = m_h^* = m$, откуда следует равенство $g\mu_B H = \hbar\omega_c$.

Благодаря равенству эффективных масс электронов и дырок соответствующее выражение для n_h совпадает с (7.15), если заменить в нем $\epsilon_F^e(H)$ на $\epsilon_F^h(H)$. Незвестные величины $\epsilon_F^e(H)$ и $\epsilon_F^h(H)$ при каждом значении магнитного поля определяются из двух уравнений: $n_e = n_h$ и $\epsilon_F^e(H) + \epsilon_F^h(H) = \epsilon_\pi$. Из них следует, что уровень Ферми, как и при $H=0$, остается точно посередине между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны (рис. 199, а) и

$$\epsilon_F^e(H) = \epsilon_F^h(H) = \epsilon_F^0 = \frac{\epsilon_\pi}{2}.$$

Чтобы упростить анализ выражения (7.15) для концентрации носителей, перейдем к ультраквантовому пределу магнитных полей. При этом в двойной сумме останется только один член, соответствующий $s=-1$, $n_{\max}(s=-1)=0$:

$$n_e = n_h = \frac{\hbar \omega_c \cdot m^{3/2}}{\sqrt{2} \pi^2 \hbar^3} (\epsilon_F^0)^{1/2}. \quad (7.16)$$

Из этого выражения следует, что, несмотря на постоянство энергии Ферми, концентрация носителей увеличивается пропорционально росту степени вырождения 0^- уровней Ландау для электронов и дырок.

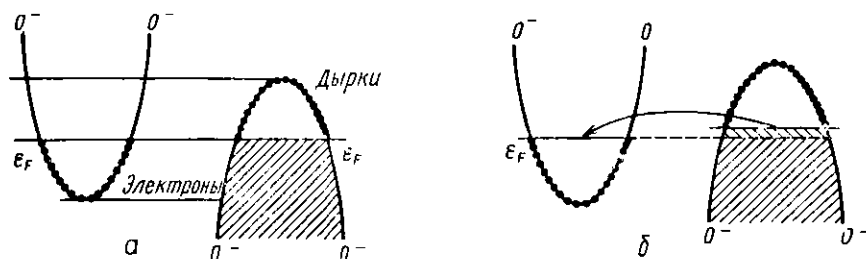


Рис. 199

Покажем, что увеличение концентрации происходит по-прежнему в результате перетекания электронов из валентной зоны в зону проводимости. Из рис. 199, а видно, что в ультраквантовом пределе все занятые электронные состояния во второй зоне (в зоне проводимости) расположены ниже уровня Ферми на параболы, которая является последним уровнем Ландау 0^- . Электронная система полностью одномерна, энергия каждого состояния зависит только от значения квазимпульса p_z . Дырочные состояния также расположены на уровне Ландау и занимают часть параболы выше уровня Ферми в первой зоне. Ниже уровня Ферми первая (валентная) зона заполнена электронами.

Рост вырождения в магнитном поле каждого состояния на уровне 0^- означает, что вместимость зоны проводимости при постоянных геометрических размерах параболы 0^- на рис. 199, а (размеры параболы 0^- специально фиксированы в рассматриваемом случае) непрерывно увеличивается. Если бы количество электронов в зоне проводимости не пополнялось, то граница ее заполнения, т. е. высота уровня Ферми, должна была бы понижаться, поскольку при увеличении вместимости каждого состояния по p_z постоянное число электронов заполняло бы все меньшую и меньшую часть электронной параболы.

Однако уровень Ферми в одной зоне не может быть ниже, чем в другой. Его понижение в зоне проводимости привело бы к тому,

что часть электронов в валентной зоне, находящихся вблизи уровня Ферми, оказалась бы в энергетически невыгодном положении (рис. 199, б). Эти электроны немедленно перетекали бы в зону проводимости, что привело бы к выравниванию уровней в обеих зонах. На самом деле понижения уровня Ферми в зоне проводимости не происходит; при увеличении вместимости этой зоны в магнитном поле идет непрерывное перетекание электронов из валентной зоны, которое точно соответствует приросту емкости зоны проводимости и тем самым компенсирует изменение границы ее заполнения. При этом, естественно, число электронов ниже уровня Ферми в валентной зоне убывает в результате уменьшения средней плотности состояний, но в соответствии с этим растет число вакансий (дырок), которое постоянно остается равным числу электронов в зоне проводимости. Магнитное поле играет роль насоса, который, управляя вырождением состояний, перекачивает электроны из одной зоны в другую.

В этом заключается второй механизм изменения концентрации носителей в магнитном поле. По своей природе он отличается от механизма, связанного с движением границ зон.

В общем случае оба механизма действуют одновременно, вызывая перетекание электронов из одной зоны в другую. Общее число заполненных состояний в зонах как в том, так и в другом случае не меняется.

Покажем, что в двухзонном металле с квадратичным изотропным энергетическим спектром электронов и дырок не наблюдается осцилляционной зависимости концентрации n_e и n_h от магнитного поля. Это справедливо в общем случае при различных значениях эффективных масс носителей.

Будем исходить из того, что в двухзонном металле при любом значении магнитного поля H

$$n_e(H) = n_h(H) \text{ и } \epsilon_F^e(H) + \epsilon_F^h(H) = \epsilon_\pi(H).$$

Вначале для простоты опустим спиновое расщепление электронных и дырочных уровней Ландау. В этом случае выражения для концентрации носителей в магнитном поле запишутся в виде

$$\begin{aligned} n_e &= \frac{\sqrt{2} \hbar \omega_c^e (m_e^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n=n_{\max}^e} \sqrt{\epsilon_F^e(H) - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c^e}, \\ n_h &= \frac{\sqrt{2} \hbar \omega_c^h (m_h^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n=n_{\max}^h} \sqrt{\epsilon_F^h(H) - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c^h}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Здесь значения $n_{\max}^e$ и $n_{\max}^h$ определяются неравенствами (6.44) записанными для электронов или для дырок соответственно. Напомним, что эффективная масса, входящая в выражение для квадратичного изотропного закона дисперсии, совпадает с изотропной

циклотронной массой и массой плотности состояний. Вследствие этого имеем

$$\hbar\omega_c m_e^* = \hbar\omega_c^h \cdot m_h^* = \frac{|e|\hbar H}{c}.$$

Приравниваем друг к другу выражения (7.17) для $n_e(H)$ и $n_h(H)$. После сокращения общих множителей получим

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{n_{\max}^e} \sqrt{m_e^* \varepsilon_F^e(H) - \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{|e|\hbar H}{c}} &= \\ = \sum_{n=0}^{n_{\max}^h} \sqrt{m_h^* \varepsilon_F^h(H) - \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{|e|\hbar H}{c}}, \end{aligned} \quad (7.18)$$

причем согласно неравенствам (6.44) $n_{\max}^e$ и $n_{\max}^h$ определяются величиной отношений $\varepsilon_F^e(H)/\hbar\omega_c^e$ и $\varepsilon_F^h(H)/\hbar\omega_c^h$ соответственно. Отсюда вытекает, что

$$m_e^* \varepsilon_F^e(H) = m_h^* \varepsilon_F^h(H) \quad (7.19)$$

и, следовательно, при любом значении магнитного поля справедливости соотношения вида (7.4) и (7.5):

$$\frac{\varepsilon_F^e(H)}{\varepsilon_F^h(H)} = \frac{m_h^*}{m_e^*}, \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_F^e(H) &= \frac{m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \varepsilon_{\pi}(H), \\ \varepsilon_F^h(H) &= \frac{m_e^*}{m_e^* + m_h^*} \varepsilon_{\pi}(H). \end{aligned} \quad (7.21)$$

Нетрудно показать, что эти выражения справедливы и при учете спинowego расщепления, если выполнено условие

$$\frac{m_e^*}{m_h^*} = \frac{m_e^s}{m_h^s}. \quad (7.22)$$

Зависимость энергии перекрытия от магнитного поля связана с монотонным движением границ зон и определяется формулами (7.8) и (7.9). Таким образом, выражения (7.21) показывают, что $\varepsilon_F^e(H)$ и $\varepsilon_F^h(H)$ также являются монотонными функциями магнитного поля.

Отсутствие осцилляций энергии Ферми электронов и дырок и, как следствие этого, отсутствие осцилляций концентраций n_e и n_h

связано с тем, что при выполнении условий (7.20) и (7.22) уровни Ландау для электронов и дырок, двигаясь в противоположных направлениях в магнитном поле, одновременно пересекают уровень Ферми.

При выполнении этих условий диаграммы уровней Ландау для электронов и дырок (см., например, рис. 192) геометрически подобны друг другу и отличаются только масштабом в $\epsilon_F^e/\epsilon_F^h$ раз. Однако уровни для электронов и дырок с одним и тем же номером n проходят при своем движении в магнитном поле расстояния, которые находятся в том же отношении друг к другу.

Значение обратного магнитного поля $1/H_n$, при котором n -й уровень Ландау пересекает уровень Ферми, определяется выражением (6.64). В силу равенства (7.19) значения $1/H_n$ для электронов и дырок совпадают между собой:

$$\left(\frac{1}{H_n}\right)^e = \frac{|e|\hbar}{m_e^* \epsilon_F^e(H) \cdot c} = \left(\frac{1}{H_n}\right)^h = \frac{|e|\hbar}{m_h^* \epsilon_F^h(H) \cdot c}. \quad (7.23)$$

По мере одновременного приближения снизу и сверху к уровню Ферми очередных электронного и дырочного уровней Ландау не происходит поднятия или опускания уровня Ферми, как это было в случае однозонного металла.

Одновременность пересечения уровня Ферми дырочными и электронными уровнями Ландау нарушается в двухзонном металле с анизотропным спектром. На примере такого металла можно продемонстрировать немонотонный характер зависимости энергии Ферми электронов и дырок от магнитного поля.

Рассмотрим случай анизотропного квадратичного спектра электронов и дырок, общий вид которого совпадает с выражением (3.32). Спектр каждого типа носителей характеризуется тремя главными компонентами тензора эффективных масс:

$$(\vec{m}_e)_x, (\vec{m}_e)_y, (\vec{m}_e)_z \text{ и } (\vec{m}_h)_{x'}, (\vec{m}_h)_{y'}, (\vec{m}_h)_{z'}.$$

Главные оси ρ_x, ρ_y, ρ_z для электронного эллипсоида не обязательно совпадают с главными осями $\rho_{x'}, \rho_{y'}, \rho_{z'}$ для дырочного. Концентрации носителей n_e и n_h теперь определяются массами плотности состояний электронов $(\vec{m}_e)_d$ и дырок $(\vec{m}_h)_d$, которые равны

$$\begin{aligned} (\vec{m}_e)_d &= [(\vec{m}_e)_x \cdot (\vec{m}_e)_y \cdot (\vec{m}_e)_z]^{1/3}, \\ (\vec{m}_h)_d &= [(\vec{m}_h)_{x'} \cdot (\vec{m}_h)_{y'} \cdot (\vec{m}_h)_{z'}]^{1/3}. \end{aligned} \quad (7.24)$$

Используя для определения концентрации электронов n_e или дырок n_h при $H=0$ формулу (1.9), в которой заменено на соответствующую массу плотности состояний (7.24), а также равенство $n_e = n_h$, можно найти отношение $\epsilon_F^e(0)$ и $\epsilon_F^h(0)$ при $H=0$:

$$\frac{\epsilon_F^e(0)}{\epsilon_F^h(0)} = \frac{(\vec{m}_h)_d}{(\vec{m}_e)_d}. \quad (7.25)$$

Однако в общем случае циклотронные массы электронов и дырок для произвольного направления магнитного поля $\mathbf{H}$ не совпадают с соответствующими массами плотности состояний. Вследствие этого при анизотропном спектре носителей тока из равенства $n_e = n_h$, где n_e и n_h задаются выражениями

$$n_e = \frac{\sqrt{2} \hbar \omega_c^e (m_e^*)_d^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n_{\max}^e} \left[\epsilon_F^e(H) - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c^e \right]^{1/2},$$

$$n_h = \frac{\sqrt{2} \hbar \omega_c^h (m_h^*)_d^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \sum_{n=0}^{n_{\max}^h} \left[\epsilon_F^h(H) - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c^h \right]^{1/2},$$
(7.26)

не вытекает равенство отношений $\epsilon_F^e(H)/\epsilon_F^h(H) = \hbar \omega_c^e / \hbar \omega_c^h$, которое определяет одновременность прохождения уровней Ландау электронов и дырок через уровень Ферми. Отсюда следует, что при анизотропном спектре носителей тока ультраквантовый предел магнитных полей достигается неодновременно для электронов и для дырок.

Для простоты дальнейшего изложения рассмотрим двухзонный металл, у которого анизотропный спектр имеют только одни электроны.

Введем следующие обозначения:

$$(m_h^*)_{x'} = (m_h^*)_{y'} = (m_h^*)_{z'} = M,$$

$$(m_e^*)_{x'} = m_1, \quad (m_e^*)_{y'} = m_2, \quad (m_e^*)_{z'} = m_3, \quad (m_e^*)_{d'} = m_d.$$
(7.27)

Очевидно, при этом $(m_h^*)_{d'} = M$.

Для реальных веществ обычно справедливо неравенство $m_d \ll M$. Будем считать его выполненным. Кроме того, будем предполагать сильную анизотропию электронного спектра, т. е. положим $m_2, m_3 \ll m_1$. Рассмотрение проведем для ориентации магнитного поля $\mathbf{H}$ вдоль главной оси l электронного эллипсоида. Циклотронная масса m_e^e электронов при этом равна $\sqrt{m_2 m_3}$. Для нее справедливы неравенства

$$m_e^e \ll m_d; \quad m_e^e \ll M. \quad (7.28)$$

Циклотронная масса дырок при любой ориентации поля совпадает с M . Влияние анизотропии спектра вначале удобно рассмотреть для фиксирования границ зон, полагая спиновые массы электронов m_e^s и дырок M^s совпадающими с соответствующими циклотронными массами. Полученный результат может быть обобщен на случай произвольного движения границ зон.

Итак, будем считать вначале, что перекрытие зон ϵ_π фиксировано ($A_e = A_h = 0$). Перепишем отношение (7.25) в новых обозначениях

$$\epsilon_F^e / \epsilon_F^h = M / m_d. \quad (7.29)$$

В нашем случае $m_d < M$ и $\epsilon_F^e > \epsilon_F^h$.

Схема зонного спектра при $H=0$ совпадает со схемой, изображенной на рис. 191. Условие $m_e \ll M$ означает, что $\hbar\omega_c^e \gg \hbar\omega_c^h$, поэтому в магнитных полях, в которых $\hbar\omega_c^e \ll \epsilon_F^e$, при $H=0$ можно не учитывать квантования энергии дырок и считать их энергетический спектр (вследствие крайне малых расстояний между уровнями Ландау для дырок) квазинепрерывным. Иными словами, номера n^h уровней Ландау для дырок, пересекающих уровень Ферми, значительно превышают номера n^e уровней Ландау для электронов: $n^h \gg n^e$. Схема уровней Ландау в таких полях показана на рис. 200.

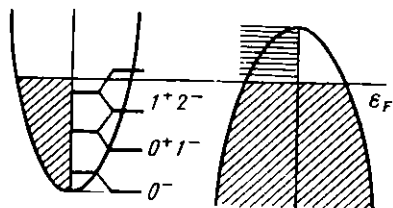


Рис. 200

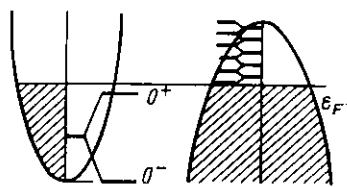


Рис. 201

Положение уровня Ферми в магнитном поле при этих условиях зависит в основном только от движения электронных уровней Ландау. Когда очередной уровень Ландау для электронов подходит к уровню Ферми, он приподнимается: эллипсоид Ферми расширяется. После того как уровень Ландау освободился от электронов, эллипсоид Ферми сжимается, а уровень Ферми приближается к следующему квантовому уровню. Это приводит к осцилляциям энергии Ферми электронов ϵ_F^e , а вследствие равенства $\epsilon_F^e + \epsilon_F^h = \epsilon_\pi = \text{const}$ — также и энергии Ферми дырок.

Когда уровень Ферми приподнимается, уменьшается ϵ_F^h . При этом концентрация дырок n_h и равная ей концентрация электронов n_e уменьшаются (точнее, n_e и n_h проходят через локальный относительный минимум): электроны с освобождающегося уровня Ландау перетекают в валентную зону. Затем, когда квантовый уровень полностью освободится от электронов и пересечет границу Ферми, уровень Ферми начинает быстро понижаться навстречу следующему квантовому уровню, на который при этом обратно перетекают электроны из валентной зоны. Таким образом, осцилляции n_e и n_h связаны с периодическим перетеканием электронов из одной зоны в другую, не меняющим общее количество электронов.

Рассмотрим переход к ультраквантовому пределу для электронов, сопровождающийся выходом квантового уровня 0^+ . Соответствующая этому схема уровней Ландау показана на рис. 201.

После выхода уровня 0^+ уровень Ферми для электронов начнет опускаться к последнему оставшемуся уровню 0^- . Это приведет к уменьшению энергии Ферми электронов и росту энергии Ферми дырок. Электроны из валентной зоны начнут перетекать на электронный уровень 0^- , вызывая увеличение концентрации n_c и n_h .

Если при $H=0$ отношение между ϵ_F^e и ϵ_F^h определялось отношением M/m_a (7.29), то теперь $\epsilon_F^e \rightarrow 0$, как $(1/\hbar\omega_c)^2$, а ϵ_F^h приближается к значению фиксированного перекрытия зон ϵ_a . Концентрация носителей, которая вначале довольно резко возрастает после выхода электронного уровня 0^+ вследствие понижения уровня Ферми, далее определяется только увеличением вырождения уровня 0^- и становится пропорциональной магнитному полю H .

Мы уже отмечали раньше, что магнитные поля, при которых $\hbar\omega_c$ по порядку величины достигает ϵ_F^h , для обычных металлов соответствуют практически недостижимым значениям $H \sim (10^8 - 10^9)$ Э.

Тем не менее это не означает, что изучение ультраквантового предела по магнитному полю совершенно недоступно для экспериментального исследования и обсуждение явлений в этой области полей не имеет практического смысла. Полученная оценка для магнитных полей H_a относится к металлам, размер поверхности Ферми которых одного порядка с характерным размером зоны Бриллюэна.

Однако построение поверхности Ферми методом Харрисона показывает, что у многих металлов помимо больших электронных или дырочных поверхностей существуют небольшие поверхности, размер которых мал по сравнению с характерной величиной $\hbar/a$ (см., например, рис. 110 — электронная поверхность свинца в 4-й энергетической зоне). Квазичастицы, расположенные на этих поверхностях, представляют собой малые группы носителей, эффективная масса которых, как правило, на несколько порядков меньше m_0 . Соответствующая энергия Ферми ϵ_F также весьма мала по сравнению со значением (5—10) эВ, относящимся к большим группам носителей.

Малые группы носителей имеются в двухвалентных металлах, таких как Be, Mg, Zn, Cd, в трехвалентных — Al, Ga, Tl, In, а также в полуметаллах — As, Sb, Bi, концентрация электронов в которых составляет 10^{-4} — 10^{-5} на один атом. Аналогичными свойствами обладают различные сплавы этих металлов друг с другом. Наконец, к веществам с вырожденной электронной системой, подобным однозонному металлу, относятся сильнолегированные полупроводники, граница ферми-распределения в которых определяется степенью легирования и может быть сделана весьма низкой.

Энергия Ферми малых групп носителей в указанных веществах лежит в интервале от единиц мэВ до 1 эВ, а циклотронные массы составляют $(10^{-1}—10^{-3}) m_0$. В соответствии с этими значениями ультраквантовый предел достигается в магнитных полях от 10^3 до 10^6 Э, которые в настоящее время легко получаются экспериментально. Таким образом, для некоторых групп носителей можно практически наблюдать выход последних уровней Ландау, а также процесс конденсации носителей на единственный уровень 0-.

§ 2. ОБРАЗОВАНИЕ ФАЗЫ ЭКСИТОННОГО ДИЭЛЕКТРИКА ПРИ ПЕРЕХОДЕ «МЕТАЛЛ—ДИЭЛЕКТРИК» В ДВУХЗОННОМ МЕТАЛЛЕ

На возможность образования экситонной фазы в области перехода металл — диэлектрик впервые указал Н. Мотт еще в 1949 г. Он высказал предположение, что в металле с малым перекрытием зон основное состояние может быть неустойчивым относительно образования связанных состояний из электрона и дырки, которые впоследствии получили название экситонов Мотта — Ванье.

Связанные состояния электрона и дырки возникают в результате кулоновского притяжения между этими частицами, подобно тому как связываются кулоновскими силами электрон и протон в атоме водорода или электрон и позитрон в атоме позитрония. По существу, экситон представляет собой квазиатом, способный свободно перемещаться по кристаллу.

Энергию связи ϵ_0 электрона и дырки в экситоне и его эффективный радиус r_0 можно оценить по известным формулам Бора, учитывая, что эффективные массы электронов m_e^* и дырок m_h^* отличаются от массы m_0 свободного электрона и что кулоновское взаимодействие двух зарядов в кристалле ослаблено пропорционально диэлектрической проницаемости κ среды:

$$\epsilon_0 = \frac{1}{2} \frac{m^* e^4}{\kappa^2 \hbar^2}, \quad r_0 = \frac{\kappa \hbar^2}{m^* e^2}, \quad (7.30)$$

где $m^* = (m_e^{*-1} + m_h^{*-1})^{-1}$ — приведенная эффективная масса электрона и дырки. Величина ϵ_0 получила название эффективного ридберга: Ry^* .

Величины ϵ_0 и r_0 можно выразить через энергию ионизации Ry и радиус r_B первой боровской орбиты в атоме водорода

$$\begin{aligned} \epsilon_0 = Ry^* &= \frac{m^*}{m_0} \cdot \frac{1}{\kappa^2} Ry \simeq 13,6 \frac{m^*}{m_0} \cdot \frac{1}{\kappa^2} \text{ эВ}, \\ r_0 &= \kappa \frac{m_0}{m^*} r_B \simeq 0,5 \cdot 10^{-8} \kappa \frac{m_0}{m^*} \text{ см}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Формулы (7.30) и (7.31) описывают энергию связи и радиус ос-

новного состояния экситона, которое соответствует значению главного квантового числа $n=1$. Аналогия между экситоном и атомом водорода распространяется и на возбужденные состояния, энергия Ry_n^* которых определяется такой же формулой, как и в теории Бора:

$$Ry_n^* = \frac{Ry^*}{n^2} = \frac{e_0}{n^2}. \quad (7.32)$$

Впервые экситоны Мотта — Ванье наблюдались в 1952 г. в записи меди. При возбуждении экситонов удалось наблюдать серии переходов, аналогичные сериям Лаймана и Бальмера в атоме водорода.

В известных полупроводниках и металлах с равными концентрациями электронов и дырок энергия связи экситонов на 3—5 порядков меньше характерных атомных энергий, а их эффективный радиус значительно больше межатомных расстояний в кристалле. Таким образом, экситон в кристалле, по существу, является макроскопическим образованием. Конкретная атомная структура кристалла при этом существенна лишь постольку, поскольку ею определяются параметры m^* и κ . Зная эти параметры, можно рассматривать экситон как квазиатом, движущийся в вакууме. Для наглядного представления можно считать, что орбиты электрона и дырки в экситоне при их движении вокруг общего центра масс охватывают большое число атомных ячеек. Вследствие этого кулоновское взаимодействие электрона и дырки определяется усредненной макроскопической величиной κ .

Если в полупроводнике или в металле с равным числом электронов и дырок происходит самопроизвольное образование экситонов, то металл или полупроводник переходят в новое состояние, называемое экситонным диэлектриком. Само название нового состояния вещества, в котором носители тока связаны в экситоны, отражает тот факт, что экситоны являются электрически нейтральными образованиями, вследствие чего проводимость системы экситонов при абсолютном нуле температуры, как и в диэлектрике, равна нулю. При конечной температуре T часть экситонов разрушается в результате термического возбуждения и проводимость в экситонном диэлектрике осуществляется небольшим количеством электронов и дырок, находящихся в неспаренном состоянии.

Переход в состояние экситонного диэлектрика связан с неустойчивостью основного состояния металла или полупроводника относительно образования электронно-дырочных пар. Условие, при котором такой переход может происходить, наиболее просто получить, рассматривая в качестве исходной системы полупроводник с величиной запрещенной зоны ε_g .

Для образования экситона Мотта — Ванье в собственном полупроводнике при $T=0$ К необходимо затратить энергию $\varepsilon_g - \varepsilon_0$. Уровень энергии, соответствующий основному состоянию экситона, отстоит от дна зоны проводимости на величину ε_0 вниз (или на величину $\varepsilon_g - \varepsilon_0$ вверх от потолка валентной зоны). Это можно

пояснить следующим образом: для генерации электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне необходимо затратить энергию, равную ϵ_g ; при образовании экситона энергия системы, состоящей из электрона и дырки, уменьшается на величину энергии связи ϵ_0 . Таким образом, при $\epsilon_g - \epsilon_0 > 0$ существование экситона является энергетически невыгодным. При таких условиях экситон имеет конечное время жизни, он исчезает в результате рекомбинации электрона и дырки.

В полупроводнике, у которого экстремумы зоны проводимости и валентной зоны расположены в одной и той же точке импульсного пространства при $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0$ (полупроводник с прямой запрещенной зоной), возбуждение электрона в зону проводимости соответствует прямому переходу между зонами и образующийся экситон в основном состоянии имеет импульс, равный нулю (рис. 202, а). Такой экситон называется прямым.

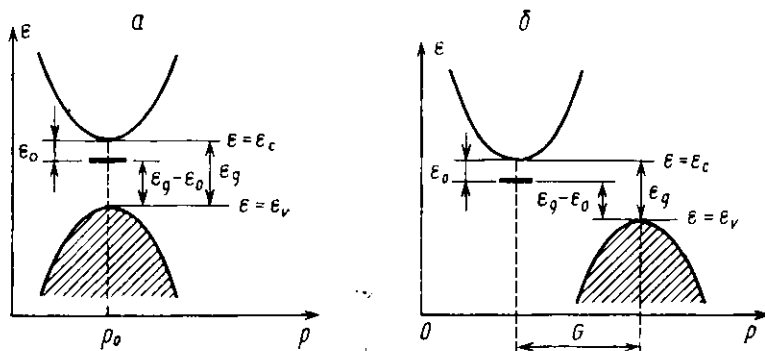


Рис. 202

В том случае, когда экстремумы зоны проводимости и валентной зоны смещены относительно друг друга на вектор $\mathbf{G}$, возбуждение электрона в зону проводимости приводит к образованию непрямого экситона с импульсом в основном состоянии, равным $\mathbf{G}$ (рис. 202, б). Наличие импульса $\mathbf{G}$ у непрямого экситона не означает, что он имеет отличную от нуля скорость v_{ex} . Поскольку основное состояние экситона соответствует минимуму энергии ϵ_{ex} экситона, $v_{ex} = \frac{\partial \epsilon_{ex}}{\partial \mathbf{p}} = 0$.

Различие между прямыми и непрямыми экситонами существенно проявляется в процессах поглощения и испускания света. Электрон и дырка, связанные в покоящийся прямой экситон, могут непосредственно рекомбинировать с испусканием фотона с энергией $\hbar\nu = \epsilon_g - \epsilon_0$. Для не прямых экситонов такой процесс запрещен законом сохранения импульса и может идти только в том случае, если импульс $\mathbf{G}$ будет отдан решетке кристалла с испусканием фо-

нона. Вследствие этого время жизни непрямых экситонов на 2—3 порядка больше, чем прямых.

Образование экситонов в полупроводнике при $T=0$ К становится энергетически выгодным при условии, что энергия ϵ_0 связи экситонов превосходит величину ϵ_g . Из энергетических соображений ясно, что при $\epsilon_g - \epsilon_0 < 0$ полупроводниковое состояние становится неустойчивым относительно самопроизвольного образования экситонов. При этом для всех электронов в валентной зоне, находящихся выше экситонного уровня, становится энергетически выгодным перейти в зону проводимости и образовать пары с возникающими в результате их перехода дырками в валентной зоне.

Таким образом, если в полупроводнике каким-либо способом уменьшить величину запрещенной зоны ϵ_g , то разность $\epsilon_g - \epsilon_0$ будет уменьшаться и, пройдя через нуль, может стать отрицательной *).

При $\epsilon_g < \epsilon_0$ и $T=0$ К начнется самопроизвольное образование экситонов и полупроводник перейдет в экситонный диэлектрик.

Энергетический спектр экситонного диэлектрика не может быть описан в одночастичном приближении, которое является вполне удовлетворительным для описания энергетического спектра металлов и полупроводников. В экситонном диэлектрике межэлектронные корреляции приводят к качественному изменению исходного электронного спектра.

Другим примером сильного влияния межэлектронных корреляций на электронный спектр является сверхпроводимость. В этом случае даже слабое притяжение электронов через фононы приводит к перестройке спектра вблизи поверхности Ферми, связанной с образованием куперовских пар, и к полному изменению всех электронных свойств вещества.

Теоретически показано, что экситонный диэлектрик имеет энергетический спектр, подобный спектру сверхпроводника. Это подобие основано на том, что экситоны, как и куперовские пары, являются бозе-частицами (в отличие от исходных ферми-частиц — электронов и дырок) и образуют в новой фазе бозе-конденсат. Экситонный диэлектрик, как и сверхпроводник, возникает путем фазового перехода второго рода. Энергетические состояния, соответствующие спаренным электронам в экситонном диэлектрике, подобны состояниям нормальных электронов в сверхпроводнике, отделены от области свободных состояний энергетической щелью Δ . Температура T_k перехода в экситонный диэлектрик, так

*) Такое утверждение не совсем точно для полупроводника с прямой запрещенной зоной, в котором уменьшение ϵ_g до нуля приводит к переходу в новое состояние вещества, получившее название бесщелевого. В кристаллах определенной симметрии переход к бесщелевому состоянию сопровождается уменьшением эффективных масс электронов и дырок и ростом диэлектрической проницаемости, в результате чего происходит уменьшение энергии связи экситонов ϵ_0 (см. (7.30)) и разность $\epsilon_g - \epsilon_0$ остается положительной при любых значениях ϵ_g . При уменьшении энергетической щели ϵ_g в таком полупроводнике экситонный диэлектрик не образуется.

же как и температура сверхпроводящего перехода, связана со щелью Δ_0 при $T=0$ К соотношением

$$T_k = \frac{\gamma}{\pi} \frac{\Delta_0}{k}, \quad (7.33)$$

где $\gamma=0,577$.

При образовании экситонного диэлектрика из полупроводника с конечной величиной запрещенной зоны $\epsilon_g < \epsilon_0$ энергетическая щель $\Delta_0 \simeq \epsilon_g - \epsilon_0$. Эта величина достигает максимума и близка к энергии связи экситонов при $\epsilon_g=0$, т. е. в области перехода диэлектрик — металл.

Концентрация неспаренных электронов и дырок в экситонной фазе пропорциональна $\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)$ и обращается в нуль при $T=0$ К. Поэтому по проводимости экситонный диэлектрик подобен полупроводнику с эквивалентной запрещенной зоной, равной Δ . Однако термодинамические и кинетические свойства экситонной фазы существенно отличаются от свойств металла или полупроводника, что позволяет говорить об экситонном диэлектрике как о новом состоянии вещества. В частности, в экситонной фазе должна наблюдаться особенность теплопроводности, связанная с экситонами; теоретически предсказана сверхтекучесть экситонов, образующих бозе-конденсат, и т. д.

Остановимся на образовании экситонного диэлектрика в металле с равным числом электронов и дырок. Эта проблема теоретически рассматривалась в целом ряде работ и достаточно хорошо изучена.

Известно, что величина взаимодействия электрона и дырки в металле определяется параметром g , который равен

$$g = \frac{e^2}{\hbar v_F} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\epsilon_F}} \simeq 8 \frac{r_D^2}{r_0^2}. \quad (7.34)$$

Задача о спаривании электронов и дырок в металле точно решена в пределе малых значений $g \ll 1$, который соответствует сильно экранированному кулоновскому взаимодействию заряженных частиц. Однако даже очень слабое притяжение электронов и дырок оказывается достаточным для образования пар в специальном случае двухзонного металла, в котором поверхности Ферми электронов и дырок могут быть точно совмещены друг с другом. Такие поверхности называются конгруэнтными. В этом случае каждому электрону с импульсом p на электронной поверхности соответствует дырка с таким же импульсом на дырочной. Как показали Л. В. Келдыш и Ю. В. Копаев, электронный энергетический спектр металла с конгруэнтными поверхностями Ферми является абсолютно неустойчивым при $T=0$ К относительно спаривания электронов и дырок, в результате которого образуется экситонный диэлектрик с экспоненциально малой щелью Δ_0 .

Энергетическая щель в модели Келдыша — Копаева определяется формулой

$$\Delta_0 \approx \epsilon_0 e^{-1/g}, \quad (7.35)$$

которая по своей структуре совпадает с формулой для энергетической щели сверхпроводника в теории Бардина — Купера — Шриффера. В выражении (7.35) для энергетической щели экситонного диэлектрика роль дебаевской энергии фононов $k\theta_D$ играет энергия ϵ_0 связи пар, а роль параметра λ электрон-фононного взаимодействия — параметр кулоновского взаимодействия g . Решение, полученное при $g \ll 1$, может быть использовано для качественного описания системы при $g \leq 1$. Такое значение параметр достигает при уменьшении перекрытия зон и энергии Ферми в металле, т. е. в области перехода металл — диэлектрик. Приближенное рассмотрение показывает, что в этой области при $\epsilon_F \sim \epsilon_0$ величина щели Δ_0 по порядку величины также близка к ϵ_0 .

Зависимость энергетической щели Δ_0 экситонного диэлектрика от параметра исходного (неперестроенного) спектра металла или полупроводника, которыми являются энергия ϵ_π перекрытия зон в металле и величина запрещенной зоны ϵ_g в полупроводнике, называется щелевой функцией, или фазовой диаграммой экситонного диэлектрика. Для модели исходного спектра, рассмотренной Келдышем и Копаевым, щелевая функция имеет вид, показанный на рис. 203. Аналогично (с точностью до коэффициента пропорциональности) от ϵ_π и ϵ_g зависит критическая температура T_k экситонного перехода.

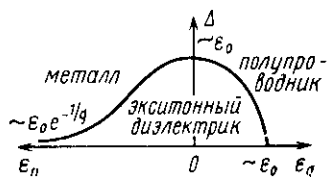


Рис. 203

Абсолютная неустойчивость электронного спектра металла в модели Келдыша — Копаева при сколь угодно слабом притяжении между электронами и дырками связана с идеальной конгруэнтностью их поверхностей Ферми. При нарушении этого условия спектр приобретает устойчивость относительно спаривания носителей разного знака, если различие Δp импульсов Ферми электронов и дырок превосходит величину $\sqrt{2m^* \epsilon_0}$. Такая ситуация при $n_e = n_h$ может быть следствием того, что поверхности Ферми электронов и дырок имеют различную форму (рис. 204, а). В этом случае большому числу электронов на поверхности Ферми невозможно сопоставить дырки с равными импульсами. При идеально подобных поверхностях Ферми различие импульсов электронов и дырок может быть вызвано влиянием легирующих примесей донорного или акцепторного типа, присутствие которых нарушает равенство $n_e = n_h$ (рис. 204, б). В этом случае условие конгруэнтности поверхностей Ферми налагает жесткое требование на степень чистоты металла, в котором в области перехода металл — диэлектрик может наблюдаться экситонный переход. Можно пока-

зять, что предельное значение концентрации n_i примесей в металле по порядку величины равно

$$n_i \sim \left(\frac{1}{4r_0} \right)^3 = \left(\frac{m^* e^2}{4\hbar^2 \kappa} \right)^3 \simeq 1,25 \cdot 10^{23} \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^3 \frac{1}{\kappa^3} \text{ см}^{-3}. \quad (7.36)$$

Действительно, образование экситонной фазы при малых концентрациях носителей тока в металле (при малом перекрытии зон $g \sim 1$) происходит тогда, когда радиус r_D дебаевского экранирования (1.41) по порядку величины сравнивается с эффективным радиусом r_0 экситона. Оценка (7.36) следует из сравнения формул (7.34) и (1.41) при $g \sim 1$. Для типичного полуметалла типа Bi ($m^*/m_0 \sim 0,01$; $\kappa \sim 100$) эта оценка дает для концентрации примесей величину $n_i \simeq 10^{11} \text{ см}^{-3}$, которая недостижима при современной технологии очистки вещества.

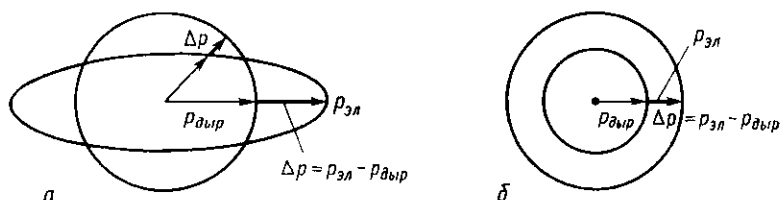


Рис. 204

Высокие требования к конгруэнтности поверхностей Ферми электронов и дырок для наблюдения экситонного перехода значительно упрощаются в присутствии сильного магнитного поля. Это связано с тем, что в ультраквантовом пределе магнитных полей концентрация носителей тока становится пропорциональной импульсу Ферми в направлении магнитного поля (см. формулу (6.61)). Соотношение

$$n = \frac{2}{\pi^2 \hbar} \frac{p_{Fz}}{l_{||}^2}$$

не зависит от величины спинового расщепления и от анизотропии спектра. Газ электронов и дырок в ультраквантовом пределе становится полностью одномерным, при этом поверхность Ферми вырождается в две точки $\pm p_{Fz}^e$ и $\pm p_{Fz}^h$ для электронов и дырок соответственно. Поскольку из равенства концентраций $n_e = n_h$ вытекает равенство импульсов электронов и дырок, то совмещение «точек Ферми» в сильном магнитном поле происходит автоматически. Наряду с этим в сильном магнитном поле уменьшается влияние примесей и различие в концентрациях электронов и дырок. Дело в том, что в сильном магнитном поле увеличивается энергия связи электронов (или дырок) с ионизированными при-

месными центрами донорного (или акцепторного) типа. Вследствие этого примесные носители тока, приводящие, например, к избытку концентрации электронов в металле, оказываются связанными с соответствующими примесными центрами. Это явление получило название магнитного вымораживания примесных носителей.

Наряду с явлением магнитного вымораживания в сильном магнитном поле наблюдается увеличение энергии связи экситонов. Оба эти эффекта имеют одну и ту же физическую природу и связаны с изменением энергетических уровней водородоподобного атома в магнитном поле.

Известно, что степень влияния магнитного поля на структуру уровней и характерные размеры атома водорода определяются величиной параметра

$$\xi = \frac{\hbar \omega_c}{2Ry} = \frac{\hbar^3 H}{|e|^3 cm_0^2}.$$

При $\xi \ll 1$ магнитное поле приводит к слабому расщеплению атомных уровней (порядка $\xi \cdot Ry$), известному под названием эффекта Зеемана. В этом случае задача решается методом теории возмущений по степеням параметра ξ . Характерные размеры атома при $\xi \ll 1$ практически не претерпевают изменения.

Условие $\xi \geq 1$ определяет область сверхсильных полей для атома водорода, в которых наблюдается существенное изменение его энергетических уровней. Нижней границей области сверхсильных полей является магнитное поле

$$H^* = \frac{|e|^3 cm_0^2}{\hbar^3} \simeq 2,3 \cdot 10^9 \text{ Э.}$$

При таком значении магнитного поля действующая на электрон сила Лоренца $\frac{|e|\hbar v}{c}$ [vH] сравнивается с силой e^2/r_B кулоновского притяжения электрона к ядру на расстоянии первой боровской орбиты r_B . Нетрудно заметить, что сила Лоренца совпадает по направлению с силой притяжения электрона к ядру, вследствие чего характерный размер атома водорода в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, начинает уменьшаться при $H > H^*$. Атом водорода в сверхсильном поле из сферически симметричного образования становится эллипсоидом вращения, вытянутым вдоль магнитной силовой линии. Уменьшение поперечных размеров атома вызывает увеличение энергии основного состояния (а также и энергии всех возбужденных уровней). Сила Лоренца оказывается дополнительной центростремительной силой, которая вызывает увеличение связи электрона с ядром.

В области $\xi = H/H^* \gg 1$ задача решается также методами теории возмущений по степеням параметра ξ^{-1} . Теоретический ана-

лиз показывает, что энергия $\epsilon_0(H)$ основного состояния при $\xi \gg 1$ логарифмически зависит от магнитного поля:

$$\epsilon_0(H) \simeq Ry \ln^2 \left(\frac{H}{H^*} \right). \quad (7.37)$$

Продольный (в направлении $\mathbf{H}$) $r_{\parallel}$ и поперечный (в направлении перпендикулярном $\mathbf{H}$) $r_{\perp}$ размеры атома становятся равными:

$$r_{\parallel} \sim r_B / \ln \frac{H}{H^*}, \quad r_{\perp} \sim l_H = \sqrt{\frac{2c\hbar}{|e|H}} \sim 1/H. \quad (7.38)$$

Таким образом, в сверхсильном магнитном поле $H \gg H^*$ атом водорода превращается в тонкую «иглу», вытянутую вдоль магнитной силовой линии (рис. 205).

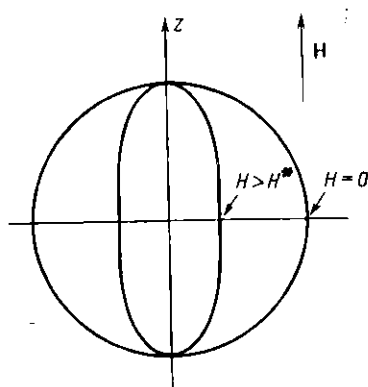


Рис. 205

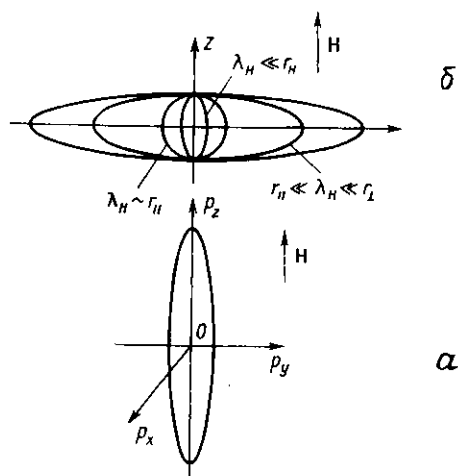


Рис. 206

Заметим, что поведение атома водорода в сверхсильном поле недоступно для изучения в земных условиях. Максимальное значение магнитного поля, полученное экспериментально путем сжатия магнитного потока, при взрыве достигает $2,5 \cdot 10^7$ Э, что соответствует значению параметра $\xi \sim 10^{-2}$. Можно, по-видимому, только предполагать, что магнитные поля $H \geq 2 \cdot 10^9$ Э существуют в некоторых областях космического пространства (например, в районе нейтронных звезд).

Экситон Мотта — Ванье, а также примесный атом донорного или акцепторного типа в металле или полупроводнике являются водородоподобными образованиями, которые ведут себя в магнитном поле подобно атому водорода. Существенное отличие, однако, заключается в том, что сила кулоновского взаимодействия для водородоподобного образования в среде ослаблена в n

раз и, кроме того, циклотронная энергия определяется величиной эффективной циклотронной массы m_c^* . В этом случае параметр ξ равен

$$\xi = \frac{\hbar \omega_c}{2 R y^*} \simeq \kappa^2 \left(\frac{m_0}{m^*} \right)^2 \frac{H}{H^*} = \frac{H}{H^{**}}, \quad (7.39)$$

где эффективное значение H^{**} нижней границы области сверхсильных полей составляет

$$H^{**} = \frac{1}{\kappa^2} \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^2 H^* = 2,3 \cdot 10^9 \frac{1}{\kappa^2} \left(\frac{m^*}{m_0} \right) \text{ Э.} \quad (7.40)$$

Для типичных полупроводников (германий, группы $A^{III}B^V$, $A^{II}B^{VI}$), для которых характерны значения $\kappa \sim 15$ и $m^*/m_0 \sim 0,05$, величина $H^{**} \sim 2 \cdot 10^4$ Э; для полуметаллов типа Bi ($\kappa \sim 100$; $m^*/m_0 \sim 0,01$) $H^{**} \sim 20$ Э. Приведенные оценки показывают, что режим сверхсильного поля для экситонов (или для примесных центров) может быть легко достигнут экспериментально в полях порядка десятков килоэрстед.

В сверхсильном магнитном поле снимается запрет на спаривание электронов и дырок, связанный с неконгруэнтностью их поверхностей Ферми, снижается требование к чистоте исходного вещества и наблюдается логарифмический рост энергии связи экситонов. Совокупность этих фактов позволяет ожидать, что переход металл — диэлектрик в магнитном поле при достаточно низких температурах должен практически всегда сопровождаться образованием экситонной фазы. Однако многочисленные исследования переходов металл — диэлектрик в магнитном поле показывают, что образование экситонного диэлектрика представляет весьма редкое явление. До сих пор образование фазы экситонного диэлектрика экспериментально было обнаружено только в веществах с резко анизотропным электронным спектром*) при ориентации магнитного поля, близкой к направлению вытянутости поверхности Ферми. В магнитном поле, перпендикулярном направлению вытянутости, спаривания электронов и дырок у тех же веществ не наблюдается.

Эта особенность образования экситонной фазы получила теоретическое объяснение только в самое последнее время. Л. В. Келдышем и Т. А. Опищенко было показано, что для металла с изотропным исходным спектром электронов и дырок (модель Келдыша — Копаева) экситонная фаза в сильном магнитном поле становится неустойчивой относительно перехода экситонный газ — экситонная жидкость. В этом случае в кристалле образуются металлизированные капли экситонной жидкости, занимающие конечный объем, соответствующий плотности жидкой фазы. Эта не-

*) Возникновение экситонной фазы впервые было обнаружено в 1970 г. при исследовании переходов металл — диэлектрик в магнитном поле у сплавов висмута с сурьмой.

устойчивость отсутствует в металле с резко анизотропным спектром электронов (или дырок), при котором продольная эффективная масса $m_{\parallel}^*$ значительно превосходит поперечную $m_{\perp}^*$ и циклотронную m_c^* эффективные массы *).

Остановимся кратко на образовании экситонной фазы при наличии анизотропии исходного спектра. Предположим, что электронная изоэнергетическая поверхность в металле представляет собой сильно вытянутый по оси z эллипсоид вращения, который характеризуется двумя компонентами тензора эффективных масс $m_{\parallel}^*$ и $m_{\perp}^*$, соответствующих направлениям вдоль и поперек вытянутости поверхности ($m_{\parallel}^* \gg m_{\perp}^*$) (рис. 206, а). Дырочную поверхность Ферми будем предполагать для простоты сферической. Пусть эффективная масса дырок M удовлетворяет неравенству

$$M \gg m_{\parallel}^* \gg m_{\perp}^*.$$

При таких условиях экситон Мотта — Ванье имеет два характерных размера:

$$r_{\parallel} = \frac{\kappa \hbar^2}{m_{\parallel}^* e^2} \text{ и } r_{\perp} = \frac{\kappa \hbar^2}{m_{\perp}^* e^2}$$

вдоль и поперек направления вытянутости соответственно. Поскольку $r_{\parallel} \ll r_{\perp}$, экситон представляет собой образование в виде сильно сплюснутого по оси z эллипсоида вращения (рис. 206, б).

Направим магнитное поле вдоль оси z . Для нахождения энергии связи экситона в магнитном поле можно воспользоваться тем обстоятельством, что из-за большого различия в массах $m_{\parallel}^* \gg m_{\perp}^*$ продольное движение электрона происходит со значительно меньшей скоростью, чем поперечное. Это позволяет использовать адиабатический принцип и усреднить движение электрона за время, много большее периода поперечного движения, но много меньшее периода продольного движения. В результате усреднения электрон оказывается в одномерной потенциальной яме, созданной кулоновским притяжением дырки, эффективный одномерный потенциал $V(z)$ которой зависит только от координаты z .

В слабых магнитных полях, при которых

$$\frac{\hbar \omega_{c\perp}}{2} < Ry_{\perp} = \frac{m_{\perp}^* e^4}{2 \hbar^2 \kappa^2},$$

где $\omega_{c\perp} = |e| \hbar / m_{\perp}^* c$, потенциал $\tilde{V}(z)$ имеет вид

$$\tilde{V}(z) = - \frac{|e|}{\kappa \sqrt{z^2 + r_{\perp}^2}}.$$

*) Задача об электронно-дырочном спаривании в металле с резко анизотропным спектром решена С. Д. Бенеславским и А. И. Буздиным.

При $z \rightarrow 0$ потенциал обрезан на расстоянии $z \sim r_{\perp}$ и дает уровень энергии основного состояния в потенциальной яме (определяющий величину энергии связи) на глубине порядка $Ry_{\perp}$.

В области магнитных полей, где

$$Ry_{\perp} \sim \frac{\hbar \omega_{c\perp}}{2} \ll Ry_{\parallel} = \frac{m_{\perp}^* e^4}{2\hbar^2 \kappa^2}, \quad (7.41)$$

характерный поперечный размер экситона совпадает с магнитной длиной $l_H = \sqrt{\frac{2ch}{|e|H}}$. При этом одномерный потенциал $\bar{V}(z)$ при $z \rightarrow 0$ оказывается обрезанным на расстояниях порядка l_H , которое значительно меньше $r_{\perp}$, в результате чего первый уровень энергии сдвигается глубже в потенциальную яму и энергия связи становится равной

$$\varepsilon_0(H) \simeq \frac{e^2}{\kappa} \sqrt{\frac{|e|H}{ch}}. \quad (7.42)$$

Эта величина значительно быстрее возрастает в магнитном поле, чем пропорциональная $\ln^2(H/H^{**})$, величина $\varepsilon_0(H)$ (7.37) в изотропном спектре. Неравенство (7.41) можно переписать для величины магнитного поля:

$$\begin{aligned} \frac{|e|^3 c m_{\perp}^{*2}}{\kappa^3 \hbar^3} &= \frac{1}{\kappa^2} \left(\frac{m_{\perp}^*}{m_0} \right)^2 H^* \ll H \ll \\ &\ll \frac{|e|^3 c m_{\parallel}^{*2}}{\kappa^3 \hbar^3} = \frac{1}{\kappa^2} \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m_0} \right) H^*. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Характерно, что при выполнении неравенства (7.43) энергия связи экситона не зависит от эффективных масс электрона и дырки и определяется только величиной магнитного поля и диэлектрической проницаемости. Экситон в этой области полей по-прежнему представляет собой сплюснутый эллипсоид вращения с поперечником порядка l_H и продольным размером порядка $r_{\parallel}$. По мере уменьшения l_H он переходит в сферу при $l_H \sim r_{\parallel}$ вблизи верхней границы области полей, задаваемой неравенством (7.43)

(рис. 206, б). В магнитных полях $H \gg H^* \left(\frac{m_{\parallel}^*}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\kappa^2}$ магнитная длина становится много меньше величины $r_{\perp}$ и экситон превращается в эллипсоид вращения, вытянутый вдоль оси z . В этой области полей задача становится эквивалентной аналогичной задаче для металла с изотропным спектром и эффективной массой, равной $m_{\parallel}^*$. В результате энергия связи экситона вновь становится логарифмической функцией магнитного поля:

$$\varepsilon_0(H) \simeq Ry_{\parallel} \ln^2 \left(\frac{H}{H^*} \left(\frac{m_0}{m_{\parallel}^*} \right)^2 \kappa^2 \right).$$

Таким образом, при резко анизотропном спектре металла имеется широкая область магнитных полей, определяемая неравенством (7.43), в которой энергия связи экситонов увеличивается в поле значительно быстрее по сравнению с изотропным случаем. Теоретически показано, что в этой области полей газ анизотропных экситонов оказывается устойчивым относительно слияния в капли. Это означает, что в указанной области полей при достаточно низких температурах

$$T \leq \frac{\varepsilon_0(H)}{k} \sim \frac{e^2}{\kappa k} \sqrt{\frac{|e|H}{ch}}$$

может образовываться фаза экситонного диэлектрика. Условия на магнитное поле, при которых экспериментально наблюдались переходы в экситонное состояние у металла с анизотропным спектром, хорошо согласуются с неравенством (7.43).

ЛИТЕРАТУРА

1. Эйхенвальд А. А. Электричество. М.; Л., Гостеоиздат, 1932. С. 473.
2. Riecke E.//Phys. Zeitschr. 1900. V. 2. P. 639.
3. Drude K.//Ann. Phys. 1900. V. 1. P. 566; V. 3. P. 369.
4. Lorentz H.//Proc. Amsterdam. Acad. 1905. V. 7. P. 438, 585, 684.
5. Sommerfeld A.//Zeitschr. Phys. 1928. V. 47. P. 1.
6. Bloch F.//Electronentheorie der Metalle, Handbuch der Radiologie. 1933. V. 6, N 1. P. 226—278.
7. Brillouin L. Waves Propagation in Periodic Structures. N. Y., 1946.
8. Лифшиц И. М., Азбель М. Я., Каганов М. И.//Электронная теория металлов. М., Наука, 1971.
9. Лифшиц И. М., Каганов М. И.//УФН. 1959. Т. 69. С. 419; 1962. Т. 78. С. 411; 1965. Т. 87. С. 389.
10. Лифшиц И. М., Косевич А. М.//ЖЭТФ. 1955. Т. 29. С. 730.
11. Лифшиц И. М., Песчанский В. Г.//ЖЭТФ. 1958. Т. 35. С. 1251; 1960. Т. 38. С. 188.
12. Абрикосов А. А. Введение в теорию нормальных металлов. М.: Наука, 1972. Гл. I, II, IV, VIII, X, XIII, XIV.
13. Косевич А. М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972.
14. Займан Дж. Электроны и фононы. М.: Мир, 1965.
15. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1977.
16. Пайерлс Р. Квантовая теория твердых тел. М.: ИЛ, 1956.
17. Киттель Ч. Квантовая теория твердых тел. М.: Наука, 1967.
18. Харрисон У. Псевдопотенциалы в теории металлов. М.: Мир, 1968.
19. Хейне В., Коэн М., Уэйр Д. Теория псевдопотенциала. М.: Мир, 1973.
20. Каллуэй Дж. Теория энергетической зонной структуры. М.: Мир, 1969.
21. Цидильковский И. М. Электроны и дырки в полупроводниках. М.: Наука, 1972. Гл. 1, 2, 4.
22. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. I. М.: Наука, 1972.
23. Физика металлов. I. Электроны/Под ред. Дж. Займана. М.: Мир, 1972.
24. Крэкнелл А., Уонг К. Поверхность Ферми. М.: Атомиздат, 1978.
25. Pippard A. B. The Dynamics of Conduction Electrons. N. Y., 1965.
26. Mott N. F., Jones H. The Theory of the Properties of Metals and Alloys. Oxford, 1936.
27. Pines D. Elementary Excitations in Solids. N. Y., 1963.
28. Кикоин И. К., Сенченкова А. Р.//ФММ. 1967. Т. 24, № 5. С. 843.
29. Barrett C. S. Structure of Metals. N. Y., 1952.
30. Born M., Oppenheimer J.//Ann. der Phys. 1927. V. 84. P. 457.
31. Lindemann F.//Phys. Zeitschr. 1910. V. 11. P. 609.
32. Born M., von Karman T.//Phys. Zeitschr. 1912. V. 13. P. 297.
33. Einstein A.//Ann. der Phys. 1907. V. 22. P. 180; 1911. V. 34. P. 170.
34. Phillips J. C., Kleinmann L.//Phys. Rev. 1959. V. 116. P. 287, 880.
35. Animalu A. O. E.//Progs. Roy. Soc. 1966. V. A294. P. 376.
36. Heine V., Abarenkov I.//Phil. Mag. 1964. V. 9. P. 451.

37. Wigner E. R., Seitz F.//Phys. Rev. 1933. V. 43. P. 704; 1934. V. 46. P. 509.
38. Shoenberg D.//Progs. Rot. Soc. 1964. V. A281. P. 62.
39. Хайкин М. С., Мина Р. Т.//ЖЭТФ. 1962. Т. 42. С. 35.
40. Moore T. W., Sprong F. W.//Phys. Rev. 1962. V. 125. P. 846; 1962. V. 126. P. 2261.
41. Onsager L.//Phil. Mag. 1952. V. 43. P. 1006.
42. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1976. Гл. 12.
43. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика. М.: Наука, 1976. Гл. 12.
44. Брандт Н. Б., Чудинов С. М. Электронная структура металлов. М.: Изд-во МГУ, 1973.
45. Mott N. F.//Phil. Mag. 1961. V. 6. P. 287.
46. Brandt N. B., Chudinov S. M.//Journ. Low Temp. Phys. 1972. V. 8, N 3/4. P. 339.
47. Хайкин М. С.//УФН. 1968. Т. 96. С. 409.
48. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
49. Хмельницкий Д. Е., Ларкин А. И.//УФН. 1982. Т. 136. С. 536.
50. Абрикосов А. А. Основы теории металлов. М.: Наука, 1987.

Учебное издание

**Брандт Николай Борисович,
Чудинов Сергей Михайлович**

ЭЛЕКТРОНЫ И ФОНОНЫ В МЕТАЛЛАХ

Зав. редакцией *Н. М. Глазкова*
Редактор *Ф. И. Горобец*
Художественный редактор *Ю. М. Добрянская*
Технический редактор *М. Б. Терентьева*
Корректоры: *Л. А. Айдарбекова, Н. И. Коновалова, С. Ф. Будаева*

ИБ № 3697

Сдано в набор 02.02.90.
Подписано в печать 27.09.90.
Формат 60×90/16 Бумага тип. № 2
Гарштура литературная. Высокая печать.
Усл. печ. л. 21,0 Уч.-изд. л. 21,91
Тираж 3000 экз. Заказ 222. Изд. № 806.
Цена 1 р. 20 к.

Ордена «Знак Почета» издательство
Московского университета.
103009, Москва, ул. Герцена, 5/7.
Типография ордена «Знак Почета» изд-ва МГУ.
119899, Москва, Ленинские горы

**МАГАЗИНЫ — ОПОРНЫЕ ПУНКТЫ
ПО ИЗУЧЕНИЮ СПРОСА И РАСПРОСТРАНЕНИЮ
КНИГ ИЗДАТЕЛЬСТВА МГУ**

*117296, Москва, Ломоносовский проспект, 18,
магазин № 110
«Университетская книжная лавка»
(для москвичей)*

*252001, Киев, ул. Крещатик, 44
магазин № 12 «Книги»*

*630090, Новосибирск, ул. Ильича, 6,
магазин № 2*

Магазин № 93 «Книга — почтой» принимает предварительные заказы на книги Издательства МГУ и высылает литературу иногородним покупателям.

Адрес магазина: 117168, Москва, ул. Кржижовского, 14, магазин № 93 «Книга — почтой»