

КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ В МЕТАЛЛАХ С ГЦК-РЕШЕТКОЙ, ПОМЕЩЕННЫХ В СВЕРХСИЛЬНОЕ МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

В. Я. Демиховский, Д. В. Хомицкий*

*Нижегородский государственный университет
603600, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 8 декабря 2000 г.

В приближении сильной связи найдено выражение для электронной волновой функции в $3D$ -кристалле, помещенном в постоянное магнитное поле. Получено трехмерное уравнение типа Харпера, описывающее спектр электрона в магнитных $3D$ -подзонах. Для различных ориентаций и величин магнитного поля, соответствующих рациональному числу квантов магнитного потока p/q , построены поверхности Ферми для одновалентных благородных металлов, причем обнаружено радикальное изменение топологии поверхностей Ферми в сильном магнитном поле. Вследствие этого в сильном поле можно ожидать существенных изменений физических свойств кристаллов. В частности, при всех четных значениях q происходит переход металл — полупроводник, а при нечетном q металлические свойства сохраняются. Также рассчитана полная энергия электронов в зависимости от магнитного поля и обнаружен минимум этой энергии при $p/q = 1/2$. Обсуждается характер термодинамических осцилляций в сверхсильном магнитном поле. Рассматриваемые в работе эффекты могут наблюдаться в полях с напряженностью несколько десятков мегагаусс.

PACS: 71.18.+y, 71.20.-b

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о блоховских электронах в сильном магнитном поле, где магнитный поток через элементарную ячейку сопоставим с квантом потока (о достижимости таких полей см., например, [1]), привлекает к себе внимание на протяжении десятилетий. В пионерских работах Харпера [2], Зильбермана [3], Азбеля [4], Хофштадтера [5] установлены основные свойства квантовых состояний блоховского $2D$ -электрона, помещенного в перпендикулярное магнитное поле. В частности, было показано, что в случае сильного периодического потенциала формируется сложный энергетический спектр, сильно зависящий от числа квантов магнитного потока через элементарную ячейку и определяемый дробью $\Phi/\Phi_0 = p/q$, где Φ — магнитный поток, $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$ — квант магнитного потока, p и q — целые взаимно простые числа. Соответствующий энергетический спектр получил название «бабочки»

Хофштадтера [5]. В случае слабого периодического потенциала происходит расщепление уровней Ландау на магнитные подзоны, число которых равно p [6, 7].

На протяжении последнего десятилетия интенсивно изучались одноэлектронные состояния в полупроводниковых $2D$ -сверхрешетках, помещенных в перпендикулярное магнитное поле. Интерес к этим объектам связан с тем, что благодаря успехам нанотехнологии в таких структурах в принципе могут наблюдаться физические эффекты, характерные для электронов, обладающих спектром типа «бабочки» Хофштадтера. Этой задаче были посвящены как теоретические [6–10], так и экспериментальные работы [11, 12]. В частности, в работах [9, 10] с использованием метода сильной связи, применяемого при выводе уравнения типа Харпера, изучались эффекты магнитного пробоя в квазидвумерных органических проводниках, а в работе [12] были представлены экспериментальные данные, свидетельствующие о наблюдении энергетической зонной структуры электронов в магнитном поле, характерной для

*E-mail: demi@phys.unn.runnet.ru

спектров типа «бабочки» Хофштадтера.

Проблема квантовых состояний в $3D$ -кристаллах, находящихся в сильном магнитном поле, также была объектом исследования. В работе [13] было показано, что в простой кубической решетке при ориентации поля вдоль $(0, 0, 1)$ при переходе от $2D$ -к $3D$ -спектру происходит простое уширение магнитных зон. При наклонной ориентации поля в трехмерной анизотропной решетке в работе [14] было обнаружено дробное квантование холловской проводимости, возникающее при положении вектора \mathbf{H} в плоскости yz . Полная энергия электронов и плотность состояний для некоторых ориентаций поля $((0, 0, 1), (0, 1, 1), (1, 1, 1))$ в простой кубической решетке вычислена в работе [15], причем в некоторых случаях обнаружено не увеличение, а уменьшение полной энергии электронов в магнитном поле. Эти расчеты для произвольной ориентации поля в простой кубической решетке развиты в работе [16], где также вычислена полная энергия электронов и плотность состояний, причем вновь обнаружено снижение полной энергии в присутствии поля. В работе [17] впервые построены изоэнергетические поверхности в магнитной зоне Бриллюэна для простой кубической решетки, помещенной в магнитное поле с ориентацией $(0, 0, 1)$ и $(1, 1, 0)$. Эти поверхности позволяют предсказать кинетические и термодинамические свойства металла (характер магнитной восприимчивости, магнитный пробой, осцилляции проводимости и т. д.) при значениях магнитного потока $p/q = 1/2, 1/3$. Там также показано, что вблизи простых рациональных значений p/q (например, $p/q = 1/2 + 1/q'$, где $q' \gg 1$) возникает система узких магнитных подзон (типа уровней Ландау), причем для расчета этих зон может быть использовано правило квантования Онзагера–Лифшица [18] на новой поверхности Ферми.

В настоящей работе рассматриваются электронные состояния в более реалистичных $3D$ -кристаллах с ГЦК-структурой, помещенных в сверхсильное магнитное поле. Вектор \mathbf{H} может быть направлен вдоль любой трансляции в кристалле. Если в слабом магнитном поле в металле образуются дискретные уровни Ландау (в $3D$ -задаче — магнитные трубки), положение которых определяется квазиклассическим правилом квантования Онзагера–Лифшица, то в сильном магнитном поле формируются магнитные энергетические подзоны, число которых равно q . При этом каждой магнитной подзоне соответствует область определения квазиимпульса, называемая магнитной зоной Бриллюэна. Кинетические и термодинамические свойства электронного газа в этом

случае определяются спектром и формой поверхностей Ферми в магнитных подзонах. Нами исследовались состояния блоховского электрона в кристаллах с ГЦК-решеткой (Cu, Ag, Au и др.), помещенных в магнитное поле, ориентированное вдоль $(0, 0, 1)$ и $(1, 1, 0)$.

В разделе 2 обсуждается проблема выбора элементарной ячейки и зоны Бриллюэна в присутствии магнитного поля. В разделе 3.1 в приближении сильной связи построена волновая функция, удовлетворяющая обобщенным условиям Блоха–Пайерлса [19]. В разделах 3.2, 3.3 найден энергетический спектр и построены поверхности Ферми вблизи простых значений числа квантов магнитного потока $(1/2, 1/3)$. Показано, что физические свойства металлов с ГЦК-решеткой могут радикально измениться в сильном магнитном поле. Так, в ориентации $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ при четных значениях знаменателя p/q , когда имеет место касание энергетических зон, металл превращается в диэлектрик (полуметалл). При нечетных значениях q металлические свойства сохраняются, однако число электронов в верхней частично заполненной зоне порядка N/q , где N — общее число свободных электронов в металле. В разделе 4 исследованы квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(1, 1, 0)$ при $p/q = 1/2$. Для магнитного потока, близкого по значениям к $p/q = 1/2$, изучается образование магнитных подзон при энергиях, соответствующих открытым орбитам. В разделе 5 обсуждаются особенности эффекта де Гааза–Ван Альфена в сильном магнитном поле. Показано, что в интервале $0 \leq p/q \leq 1$ должно наблюдаться несколько серий осцилляций магнитной восприимчивости в области магнитных полей, соответствующих значениям p/q с малыми знаменателями q . Обсуждается также влияние уширения уровней Ландау на характер магнитных осцилляций. Здесь также вычисляется полная энергия электронного газа при $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ в характерных точках $p/q = 0, 1/4, 1/3, 1/2, 2/3, 3/4, 1$. Показано, что минимум достигается при $p/q = 1/2$. Последнее обстоятельство свидетельствует о том, что в сверхсильном магнитном поле (при указанной ориентации) одновалентный металл с ГЦК-решеткой становится парамагнитным.

Очевидно, что для экспериментального наблюдения обсуждаемых в нашей работе эффектов необходимы кристаллы с большим периодом решетки и сверхсильные магнитные поля. Рекордное значение магнитного поля ($H = 28$ МГс) было получено недавно во ВНИИЭФ (г. Саров) [1]. Если период кристал-

лической решетки составляет 3–4 Å, то в таких магнитных полях поток будет равен $p/q \sim 0.1$ и можно говорить лишь об уширении уровней Ландау. В решетках с периодом 5–6 Å величина $p/q \sim 0.2–0.3$ и рассматриваемые ниже эффекты доступны экспериментальному наблюдению.

2. МАГНИТНЫЕ ТРАНСЛЯЦИИ И МАГНИТНАЯ ЯЧЕЙКА

Предварительно необходимо определить закон преобразования собственных волновых функций в магнитном поле, а также форму магнитной зоны Бриллюэна. Мы сделаем это, следуя в основном работе [20], а также [21], однако здесь будет удобно воспользоваться калибровкой Ландау. Пусть магнитное поле \mathbf{H} направлено вдоль некоторой трансляции \mathbf{a}_3 . Выберем декартову систему координат (x_1, x_2, x_3) так, чтобы одна из осей (обозначим ее x_3) была направлена вдоль магнитного поля, а две другие лежали в плоскости, перпендикулярной \mathbf{H} . Закон преобразования волновой функции при трансляциях зависит от калибровки векторного потенциала; выберем его в виде $\mathbf{A} = (0, Hx_1, 0)$.

Пусть $\psi(\mathbf{r})$ — некоторая собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r})$. При трансляции $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ (\mathbf{a} — какой-либо из периодов решетки) эта функция перейдет в $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, однако это будет уже собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, не совпадающего с $\hat{H}(\mathbf{r})$, поскольку произошла замена векторного потенциала

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + Ha_1 \mathbf{n}_2.$$

Здесь \mathbf{a} имеет проекции (a_1, a_2, a_3) в декартовой системе координат (x_1, x_2, x_3) . Для того чтобы получить собственную функцию $\hat{H}(\mathbf{r})$, надо вернуться к исходному гамильтониану, что достигается калибровочным преобразованием

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad f = -Ha_1 x_2,$$

при котором волновая функция приобретает дополнительный фазовый множитель:

$$\psi \rightarrow \psi \exp(ief/\hbar c).$$

Обозначив результат всех операций как $\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})$, определим оператор магнитных трансляций

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \exp(iha_1 x_2), \quad (1)$$

где $\mathbf{h} = |e|\mathbf{H}/\hbar c$. Как известно [21], введенный оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ может быть назван оператором трансляции в магнитном поле.

Из определения (1) следует, что при двух последовательных трансляциях на \mathbf{a} и \mathbf{a}' имеем

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} &= \hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}'), \\ \omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') &= \exp(-iha'_1 a_2), \end{aligned} \quad (2)$$

а следовательно, операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$, вообще говоря, не коммутативны —

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} = \hat{T}_{\mathbf{a}'}\hat{T}_{\mathbf{a}} \exp(-2iha'_1 a_2)$$

— и осуществляют не обычное, а проективное представление группы трансляций. Базисом этих представлений являются волновые функции стационарных состояний блоховского электрона в магнитном поле. Очевидно, что представление будет не проективным, а обычным, если в (2) выполнено условие $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = 1$. Соответственно, трансляции, для которых это условие выполнено, образуют группу магнитных трансляций, которые обеспечивают блоховский закон преобразования волновой функции. Будем различать эти трансляции с помощью индекса m : $\mathbf{a}_m = (a_{1m}, a_{2m}, a_{3m})$. Из (2) следует, что трансляции являются магнитными, если выполнено условие

$$ha_{1m}a'_{2m} = 2\pi \frac{Ha_{1m}a'_{2m}}{\Phi_0} = 2\pi p, \quad p = 1, 2, 3, \dots, \quad (3)$$

т. е. магнитный поток через площадь $a_{1m}a'_{2m}$ равен целому числу квантов потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$. В формуле (3) величины a_{1m} и a'_{2m} — это проекции двух векторов \mathbf{a}_m и \mathbf{a}'_m , осуществляющих магнитные трансляции, на оси x_1 и x_2 . В кристалле с элементарной ячейкой, построенной на некопланарных кратчайших трансляциях \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , а также $\mathbf{a}_3 \parallel \mathbf{H}$, условие (3) будет выполнено в магнитном поле, удовлетворяющем условию

$$\frac{Ha_{1x_1}a_{2x_2}}{\Phi_0} = \frac{p}{q}, \quad (4)$$

где a_{1x_1} и a_{2x_2} — проекции базовых векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 соответственно на x_1 и x_2 , а q — целое число. При этом, согласно (3) и (4), векторы \mathbf{a}_m и \mathbf{a}'_m должны быть выбраны так, чтобы $a_{1m}a'_{2m} = qa_{1x_1}a_{2x_2}$. Условие (3), таким образом, определяет не весь вектор магнитной трансляции, а лишь его проекции на оси x_1 и x_2 , лежащие в плоскости, перпендикулярной \mathbf{H} . Поэтому магнитную ячейку в 3D-пространстве кристалла можно выбрать по-разному. Для ее оптимального выбора можно воспользоваться принципами, схожими с теми, которые используются при выводе решеток Браве: при выполнении условия (3) симметрия магнитной ячейки должна соответствовать симметрии всей решетки, число прямых углов

и равных сторон должно быть максимальным, объемом магнитной ячейки должен быть минимален.

Поскольку в настоящей работе изучаются квантовые состояния блоховского электрона в ГЦК-решетке, определим магнитную ячейку и магнитную зону Бриллюэна для этого типа решетки. Оси декартовой системы (x, y, z) направим вдоль ребер куба. В такой геометрии векторы, образующие элементарную ячейку, имеют координаты $(a/2, 0, a/2)$, $(0, a/2, a/2)$, $(a/2, a/2, 0)$. Для определенности будем рассматривать две ориентации поля: $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ и $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$.

а. Пусть магнитное поле направлено вдоль $\mathbf{a}_3 = a(0, 0, 1)$, а векторный потенциал имеет вид $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$. Как следует из (4), при рассматриваемой ориентации поля дробь p/q есть число квантов магнитного потока через площадь $a^2/4$. Векторы, определяющие магнитные трансляции, при четном и нечетном значениях q удобно выбрать различным образом. А именно, для четного q магнитная ячейка строится как прямоугольный параллелепипед на векторах $\mathbf{a}_{1m} = (qa/2, 0, 0)$, $\mathbf{a}_{2m} = (0, qa/2, 0)$, $\mathbf{a}_{3m} = (0, 0, a)$. Поэтому магнитная зона Бриллюэна также будет прямоугольным параллелепипедом с квадратным основанием, построенным на векторах обратной решетки $\mathbf{b}_{1m} = (2/qa, 0, 0)$, $\mathbf{b}_{2m} = (0, 2/qa, 0)$, $\mathbf{b}_{3m} = (0, 0, 2/a)$. Для нечетного q магнитная ячейка будет наклонной призмой, ее базовые векторы имеют координаты $(qa/2, 0, a/2)$, $(0, qa/2, a/2)$, $(qa/2, qa/2, 0)$, что обусловлено наличием атомов в центрах граней ГЦК-решетки. Заметим, что на указанных базовых векторах может быть построена ячейка Вигнера-Зейтца, обладающая всеми элементами симметрии магнитной решетки. Зона Бриллюэна при $q = 3$ для рассматриваемой ориентации магнитного поля построена в разд. 3.3.

б. В случае, когда $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_3 = (a/2, a/2, 0)$, удобно выбрать новую декартову систему координат, в которой ось $x_3 \parallel \mathbf{H}$, а новые координаты (x_1, x_2, x_3) связаны со старыми выражениями

$$x_1 = \frac{y-x}{\sqrt{2}}, \quad x_2 = z, \quad x_3 = \frac{y+x}{\sqrt{2}}.$$

Векторный потенциал вновь выберем в калибровке Ландау: $\mathbf{A} = (-Hx_2, 0, 0)$. Как следует из (4), в данном случае дробь p/q есть число квантов магнитного потока через прямоугольник со сторонами $a/2\sqrt{2}$ и $a/2$, лежащий в плоскости $(x_1x_2) \perp \mathbf{H}$. Аналогично случаю а, магнитную 3D-ячейку удобно строить по-разному для четных и нечетных значений q . А именно, для четного q она может быть вы-

брана в виде прямоугольного параллелепипеда, построенного на векторах, имеющих в системе (xyz) компоненты $(a/2, a/2, 0)$, $(a/2, -a/2, 0)$, $(0, 0, qa/2)$. Обратная решетка в этом случае будет прямоугольной с основными векторами $\mathbf{b}_{1m} = (2/a, 2/a, 0)$, $\mathbf{b}_{2m} = (2/a, -2/a, 0)$, $\mathbf{b}_{3m} = (0, 0, 2/qa)$. Если q нечетное, то магнитная ячейка будет наклонной призмой, построенной на базовых векторах $(a/2, a/2, 0)$, $(a/2, -a/2, 0)$, $(a/2, 0, qa/2)$.

3. КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ ДЛЯ ОРИЕНТАЦИИ ПОЛЯ ВДОЛЬ $(0, 0, 1)$

3.1. Вывод уравнения Харпера

Волновую функцию, являющуюся собственной функцией оператора магнитной трансляции [17], для ГЦК-решетки в приближении сильной связи запишем в следующем виде:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n,m,l} g_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \times \exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)}{a/2} n\right) \times \psi_0\left(x - \frac{na}{2}, y - \frac{ma}{2}, z - \frac{la}{2}\right), \quad (5)$$

где волновая функция $\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$, описывающая s -состояния электрона в изолированном атоме, помещенном в магнитное поле, удовлетворяет уравнению Шредингера с атомным потенциалом $U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$. Суммирование в (5) ведется по всем узлам ГЦК-решетки, целые индексы (n, m, l) определяют координаты атомов кристаллической решетки. Введение фазового множителя

$$\exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)n}{a/2}\right)$$

в (5) обеспечивает правильный закон преобразования волновой функции при трансляциях, сформулированный в разд. 2. Коэффициенты g_n описывают распределение по узлам магнитной ячейки.

Получим теперь систему уравнений для коэффициентов g_n . Для этого подставим функцию (5) в уравнение Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + V(\mathbf{r}),$$

где $V(\mathbf{r})$ — кристаллический потенциал. Действуя аналогично методу сильной связи, вычисляем интегралы перекрытия между соседними узлами, получая при этом систему разностных уравнений для

коэффициентов $g_n(\mathbf{k})$. Интеграл перекрытия между соседними узлами в плоскости xy в присутствии магнитного поля имеет вид

$$A = \int \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - (m \pm 1/2)a/2 \pm (n \pm 1/2)a/2)}{a/2}\right) \times \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n^{xy}) (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (6)$$

где $\mathbf{a}_n^{xy} = ((n \pm 1/2)a/2, (m \pm 1/2)a/2, la/2)$. Очевидно, что в интеграле (6) существенна узкая область максимального перекрытия волновых функций, расположенная в точках $x = (n \pm 1/2)a/2$, $y = (m \pm 1/2)a/2$. Подставляя в фазовый множитель под знаком интеграла это значение y , мы получим

$$A = \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \left(n \pm \frac{1}{2}\right)\right) \alpha,$$

где α — значение интеграла перекрытия в отсутствие магнитного поля. Необходимо иметь в виду также, что в интеграл (6) входят атомные волновые функции в присутствии магнитного поля. Поэтому константа в интеграле перекрытия также должна отличаться от своего значения при $\mathbf{H} = 0$. Можно ожидать, что изменение формы атомной функции будет существенным в таких магнитных полях, когда циклотронная частота в плоскости, перпендикулярной \mathbf{H} , много больше характерной атомной частоты. В магнитном поле $H \approx 30$ МГц значение $\omega_c \approx 5 \cdot 10^{14} \text{ с}^{-1}$, т. е. энергия $\hbar\omega_c$ много меньше расстояния между атомными уровнями. Поэтому можно ожидать, что в таких полях форма функции ψ_0 и, следовательно, интегралы перекрытия не будут сильно отличаться от полученного выше значения. Легко убедиться также, что зеемановское расщепление в магнитных полях $H \approx 10^7$ Гс также будет много меньше характерной атомной энергии. Это значит, что положение центров энергетических зон по сравнению со случаем $\mathbf{H} = 0$ изменится незначительно.

В плоскости xz интеграл перекрытия будет равен

$$B = \int \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)}{a/2}\right) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n^{xz}) \times (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (7)$$

где $\mathbf{a}_n^{xz} = ((n \pm 1/2)a/2, ma/2, (l \pm 1/2)a/2)$. Аналогично предыдущему случаю положим $y = ma/2$ и получим, что $B = \alpha$. Наконец, интеграл перекрытия между атомами в плоскости yz можно представить в виде

$$C = \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} n\right) \alpha.$$

Подобным образом могут быть проведены вычисления и для второй группы ближайших соседей, расположенных в точках $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, a)$ и т. д. [17]. Интеграл перекрытия между волновыми функциями для этой группы соседей в отсутствие магнитного поля обозначим через r . Известно, что для большинства металлов (Cu, Ag, Au, Al) отношение $r/\alpha \ll 1$ [22].

Окончательно уравнение для коэффициентов g_n в рассматриваемой ориентации магнитного поля примет вид

$$2\alpha \left[g_{n-1} \exp\left(-i \frac{k_x a}{2}\right) \times \left(\cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n - \frac{1}{2}\right]\right) + \cos\frac{k_z a}{2} \right) + g_{n+1} \exp\left(i \frac{k_x a}{2}\right) \times \left(\cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n + \frac{1}{2}\right]\right) + \cos\frac{k_z a}{2} \right) + 2 \cos\frac{k_z a}{2} \cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} n\right) g_n \right] + r \left[g_{n-2} \exp(-ik_x a) + g_{n+2} \exp(ik_x a) + 2 \left(\cos\left(k_y a + 4\pi \frac{p}{q} n\right) + \cos k_z a \right) g_n \right] = -\varepsilon g_n. \quad (8)$$

Необходимо отметить, что в отличие от стандартного уравнения Харпера [2], в разностном уравнении (8) имеет место модуляция как диагональных, так и околodiагональных членов, а также то, что при учете взаимодействия со следующей группой ближайших соседей ($r \neq 0$) система (8) является пятидиагональной. Заметим также, что в отличие от стандартного уравнения Харпера система (8) не обладает симметрией по отношению к замене $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$. Компоненты квазиимпульса (k_x, k_y, k_z) здесь изменяются в магнитной зоне Бриллюэна, описанной в разд. 2 (пункт а).

Заметим, что волновая функция (5) с коэффициентами g_n , удовлетворяющими системе (8), описывает распределение электронной плотности, обладающее трансляционной инвариантностью только по отношению к магнитным трансляциям и неоднородное внутри магнитной ячейки. Однако в реальных кристаллах вследствие кулоновского взаимо-

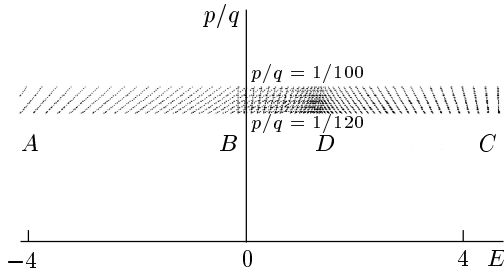


Рис. 1. Магнитные подзоны (уровни Ландау) в ГЦК-решетке в слабом магнитном поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ при $k_z = 3\pi/4a$

действия распределение электронной плотности может быть неоднородным лишь в пределах одной элементарной ячейки кристалла. Для того чтобы плотность вероятности была однородна внутри магнитной ячейки, необходимо взять линейную комбинацию функций (5), воспользовавшись вырожденностью уравнения (8) по квантовому числу k_y . Такие функции, очевидно, будут правильными функциями нулевого приближения по кулоновскому взаимодействию. Соответствующие расчеты полностью аналогичны проделанным в [17] для простой кубической решетки.

В отсутствие магнитного поля ($p/q = 0$) из системы (8) следует стандартный закон дисперсии для ГЦК-решетки при $\mathbf{H} = 0$ [22, 23]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & -4a \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \right. \\ & \left. + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right) - \\ & - 2r (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \end{aligned} \quad (9)$$

Обсудим сначала энергетический спектр, определяемый системой (8) при $r = 0$, в области слабых магнитных полей, $p/q \ll 1$, и сравним результат с квазиклассическим приближением Онзагера–Лифшица [18]. Для этого найдем спектр системы (8) при фиксированном k_z , параллельном \mathbf{H} . На рисунке 1 представлен фрагмент спектра, определяемый уравнением (8), при значении $k_z = 3\pi/4a$. Сразу же отметим, что в слабом магнитном поле энергия практически не зависит от k_x и k_y , т.е. спектр состоит из узких зон. Другими словами, уровни Ландау здесь практически не уширяются. Одновременно на рис. 2 показаны сечения той же плоскостью $k_z = 3\pi/4a$ семейства изоэнергетических поверхностей, определяемых уравнением (9). Имен-

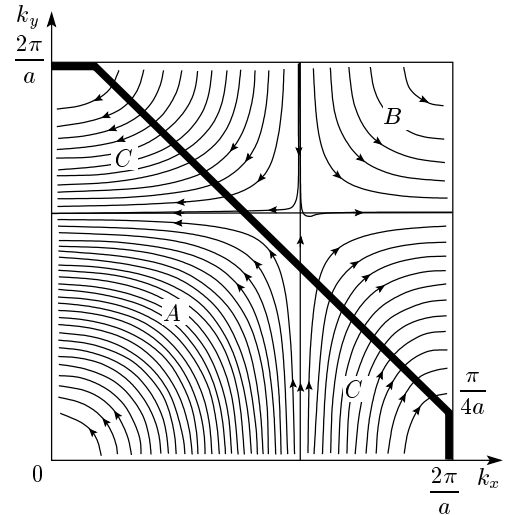


Рис. 2. Сечения семейства изоэнергетических поверхностей, определяемых (9), плоскостью $k_z = 3\pi/4a$ при $r = 0$. Жирная линия обозначает границу первой зоны Бриллюэна, а стрелки показывают направление вращения в магнитном поле

но эти сечения дают квазиклассические траектории и дискретный спектр Онзагера–Лифшица при $k_z = 3\pi/4a$. На рисунке 1 видно несколько последовательностей уровней (узких магнитных подзон), которые могут соответствовать различным квазиклассическим траекториям. Энергетический спектр в областях A, B и C на рис. 1 соответствует траекториям A, B и C на рис. 2. В областях A и B на рис. 2 траектории имеют электронный характер, а в области C — дырочный. На рисунке 1 этому отвечает различный наклон уровней (как функции магнитного потока) в областях A, B и C. Область сгущения уровней на рис. 1 (область D) отвечает сепаратрисе на рис. 2. Можно убедиться, что расстояния между уровнями на рис. 1 полностью соответствуют значениям, получаемым при квантовании Онзагера–Лифшица.

3.2. Закон дисперсии, магнитная зона Бриллюэна и поверхность Ферми при $p/q = 1/2$

При $p/q = 1/2$ спектр находится из условия обращения в нуль детерминанта второго порядка системы (8). В этом случае энергия в верхней и нижней подзонах определяется выражением

$$\varepsilon_{1,2} = \pm 4\alpha \left[\sin^2 \frac{k_x a}{2} \sin^2 \frac{k_y a}{2} + \cos^2 \frac{k_z a}{2} \left(\cos^2 \frac{k_x a}{2} + \cos^2 \frac{k_y a}{2} \right) \right]^{1/2} - 2r (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (10)$$

Получаем, что ε_1 заключена в интервале $[-2r, 4\alpha\sqrt{2} + 6r]$, а ε_2 — в $[-4\alpha\sqrt{2} - 6r, 2r]$, т. е. в области $[-2r, 2r]$ имеет место перекрытие зон, обусловленное учетом второй группы ближайших соседей в решетке. При $r = 0$ имеется лишь касание зон в точке $\varepsilon = 0$. Таким образом, второе слагаемое в законах дисперсии (9) и (10) становится существенным при наличии в спектре особенностей корневого типа в области $\varepsilon = 0$. При данной ориентации магнитного поля подобная ситуация имеет место при всех четных знаменателях дроби p/q . Как следует из изложенного выше (см. разд. 2), при $p/q = 1/2$ в рассматриваемой ориентации магнитного поля зона Бриллюэна представляет собой куб, построенный на векторах $(2\pi/a, 0, 0)$, $(0, 2\pi/a, 0)$, $(0, 0, 2\pi/a)$. Как и следовало ожидать, функция (10) периодична в этой области. Отметим, что объем магнитной зоны Бриллюэна равен $1/q^2 = 1/4$ от объема исходной зоны Бриллюэна при $\mathbf{H} = 0$, причем все состояния в магнитной зоне двукратно вырождены по k_y .

Уровень Ферми и поверхность Ферми в магнитном поле могут быть найдены из условия, что в одновалентном металле электроны (с учетом спина) занимают объем, равный половине объема исходной зоны Бриллюэна. Это можно сделать, вычисляя с помощью (10) объем в \mathbf{k} -пространстве, занимаемый электронами с энергией, не превышающей заданную. Результаты такого расчета для $r/\alpha = 1/8$, $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ и $p/q = 1/2$ представлены на рис. 3. Как следует из результатов, приведенных на рисунке, уровень Ферми лежит в области перекрытия зон. Поверхность Ферми состоит из двух типов полостей: электронных (полости 1) в верхней магнитной подзоне и дырочных (полости 2) в нижней подзоне. Поскольку область перекрытия подзон мала, что связано с условием $r \ll \alpha$, объемы полостей, занятых электронами и дырками, составляют малую часть зоны Бриллюэна. Таким образом, при $p/q = 1/2$ одновалентный металл с ГЦК-решеткой превращается в полуметалл, а при $r = 0$ — в диэлектрик. В точке t с координатами $k_x = \pi/2a$, $k_y = 0$, $k_z = -\pi/a$ и эквивалентных ей, как это следует из (10) и рис. 3, имеет место самопересечение электронных и дырочных полостей. По-видимому, в этом случае может наблюдаться магнитный пробой.

3.3. Поверхность Ферми для $p/q = 1/3$

Если магнитный поток p/q через площадь $a^2/4$ равен $1/3$, то спектр определяется из условия обращения в нуль детерминанта системы (8) третьего порядка. При этом в (8) можно положить $r = 0$, так как учет второго слагаемого в (9) необходим лишь в областях малого перекрытия подзон. Между тем, как будет видно из дальнейшего, в рассматриваемом случае уровень Ферми лежит далеко от края зоны. Трех корням кубического уравнения соответствуют три магнитные подзоны, определяемые выражениями

$$\varepsilon_1 = 2s \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right), \quad (11)$$

$$\varepsilon_2 = -2s \cos \left(\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right), \quad (12)$$

$$\varepsilon_3 = -2s \cos \left(\frac{\pi}{3} - \frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right), \quad (13)$$

где энергия измеряется в единицах α , $s = \sqrt{6 + 4 \cos k_z a}$, а

$$t = -\cos \frac{3(k_y - k_z)a}{2} - \cos \frac{3(k_y + k_z)a}{2} - 12(1 + \cos k_z a) - 2 \cos \frac{3k_x a}{2} \left(\cos \frac{3k_x a}{2} - \cos \frac{3k_y a}{2} \right).$$

Взаимное расположение магнитных подзон показано в правой части рис. 4.

В соответствии с изложенным в разд. 2, магнитная зона Бриллюэна представляет собой усеченный параллелепипед, построенный на векторах

$$\frac{2\pi}{3a}(1, 1, 3), \quad \frac{2\pi}{3a}(1, -1, -3), \quad \frac{2\pi}{3a}(-1, -1, 3)$$

и заключенный в параллелепипед $-2\pi/3a \leq k_x \leq 2\pi/3a$, $-2\pi/3a \leq k_y \leq 2\pi/3a$, $-2\pi/a \leq k_z \leq 2\pi/a$ (см. рис. 4). Ее объем составляет $1/q^2 = 1/9$ часть от объема первой зоны при $\mathbf{H} = 0$, а все состояния трехкратно вырождены по k_y . Функции, определяемые уравнениями (11)–(13), периодичны в указанной зоне Бриллюэна.

Уровень Ферми может быть найден так же, как и для случая $p/q = 1/2$. Он расположен в средней зоне, определяемой уравнением (12), при $E_F \approx 1.58$; соответствующая поверхность Ферми изображена на рис. 4.

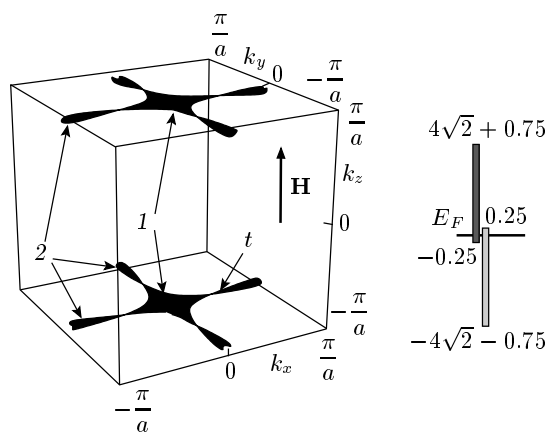


Рис. 3. Электронные (1) и дырочные (2) поверхности Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/2$ и $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$. В точке t и эквивалентных ей имеет место самопересечение. Справа показана схема перекрывающихся магнитных подзон и положение уровня Ферми $E_F = 0$. Энергия измеряется в единицах α

Необходимо отметить, что она состоит из двух полостей, имеющих электронный характер: полостей 1, которые можно назвать «холмами» (внизу) и «впадинами» (вверху) и эллипсоидальными полостями 2. Электроны заполняют области, расположенные между верхней и нижней границами зоны Бриллюэна и полостями 1, а также между боковыми гранями зоны Бриллюэна и полостями типа 2. В отличие от четных значений знаменателя дроби p/q , здесь заполнена значительная часть зоны Бриллюэна: в областях, показанных на рис. 4, находится $1/3$ от общего числа электронов. Таким образом, одновалентный металл с ГЦК-решеткой при $p/q = 1/3$ остается типичным металлом.

Обсудим также характер спектра при значениях магнитного потока, близких к $1/3$:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{3} + \frac{1}{q'}, \quad q' \gg 1. \tag{14}$$

Выше было показано, что в слабых полях, $p/q \ll 1$, закон квантования, определяемый системой (8), идентичен квазиклассическим правилам квантования Онзагера–Лифшица. В области p/q , определяемой уравнением (14), два способа расчета также приводят к одинаковому результату. Так, на рис. 5 показан фрагмент спектра при $k_z = 0$ для зоны, в которой лежит уровень Ферми. Заметим, что при $q' \gg 1$ магнитные подзоны очень узкие и выглядят как система практически дискретных уровней. Из рис. 5 ясно, что экстремальному сечению соответствует по-

Рис. 4. Два типа электронных поверхностей Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/3$ и $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$: 1 — «холмы» и «впадины», 2 — поверхности эллипсоидального типа. Справа показана схема магнитных подзон и положение уровня Ферми

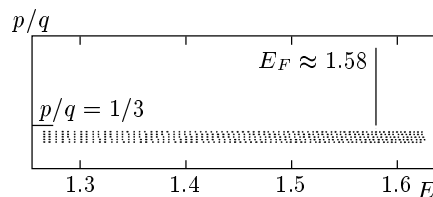


Рис. 5. Фрагмент спектра в ГЦК-решетке в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ в области p/q , близком к $1/3$, при $k_z = 0$ и $k_x = k_y = 0$. Показано положение уровня Ферми

следовательность эквидистантных уровней в области E_F . Расстояние между ними хорошо согласуется с тем значением, которое можно получить, применяя правила квантования Онзагера–Лифшица к

спектру (12) при $k_z = 0$.

4. КВАНТОВЫЕ СОСТОЯНИЯ И ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ ДЛЯ ОРИЕНТАЦИИ ПОЛЯ ВДОЛЬ (1, 1, 0)

Рассмотрим теперь случай, когда поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_3 = (a/2, a/2, 0)$. Аналогично разделу 3.1, волновую функцию в приближении сильной связи можно записать в форме (5) с новым фазовым множителем

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = & \sum_{n,m,l} g_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \times \\ & \times \exp\left(2\pi i \frac{p}{q} \frac{(x_1 - ma/2\sqrt{2})}{a/2\sqrt{2}} n\right) \times \\ & \times \psi_0\left(x_1 - \frac{ma}{2\sqrt{2}}, x_2 - \frac{na}{2}, x_3 - \frac{la}{2\sqrt{2}}\right), \quad (15) \end{aligned}$$

где целые индексы (n, m, l) определяют координаты атомов кристаллической решетки. Вычисление интегралов перекрытия в плоскостях x_1x_3 , x_1x_2 и x_2x_3 приводит к следующей системе разностных уравнений для коэффициентов g_n :

$$\begin{aligned} 4\alpha \left[\cos \frac{k_3 a}{2\sqrt{2}} \left(g_{n-1} \exp\left(-\frac{ik_2 a}{2}\right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \cos\left(\frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n - \frac{1}{2}\right]\right) \right) + \right. \\ \left. + g_{n+1} \exp\left(\frac{ik_2 a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n + \frac{1}{2}\right]\right) \right] + \\ + \frac{1}{2} \left(\cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} + \cos\left(\frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + 4\pi \frac{p}{q} n\right) \right) g_n + \\ + r \left[g_{n-2} \exp(-ik_2 a) + g_{n+2} \exp(ik_2 a) + \right. \\ \left. + 4 \cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} \cos\left(\frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + 4\pi \frac{p}{q} n\right) g_n \right] = -\varepsilon g_n. \quad (16) \end{aligned}$$

По форме система (16) совпадает с системой (8). Компоненты квазиимпульса (k_1, k_2, k_3) пробегают все значения в магнитной зоне Бриллюэна, определенной в разд. 2 (пункт б). Следует отметить, что в рассматриваемой ориентации, так же как и в случае $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$, система (16) остается пятидиагональной, а при $r = 0$ — трехдиагональной, что обеспечено оптимальным выбором калибровки векторного потенциала. Укажем на следующие интересные особенности решений системы (16). Легко видеть, что решения при четном q двукратно вырождены: энергии ε_n отвечают функции $\{g_n\}$ и $\{(-1)^n g_{n+q/2}\}$. Кроме того, так же как и в стандартном уравнении

Харпера, при $k_1 = k_2 = 0$ система (16) инвариантна относительно замены $n \rightarrow q - n$. Это свойство симметрии волновых функций отражено на рис. 7б, 8б, где представлены собственные функции системы (16). Имеет место также симметрия $k_3 \rightarrow -k_3$, как и в отсутствие магнитного поля.

При $p/q = 1/2$ из (16) следует спектр в двух магнитных подзонах:

$$\varepsilon_{1,2} = \pm 8\alpha \left| \sin \frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} \sin \frac{k_2 a}{2} \cos \frac{k_3 a}{2\sqrt{2}} \right| - 2\alpha \left(\cos \frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + \cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} \right). \quad (17)$$

Здесь мы положили $r = 0$, так как уровень Ферми, как это будет видно ниже, расположен далеко от краев зон в области их сильного перекрытия. Энергия, определяемая (17), заключена в интервалах: $\varepsilon_1 \in [-4\alpha, (4\sqrt{2} + 2)\alpha]$ и $\varepsilon_2 \in [-(4\sqrt{2} + 2)\alpha, 4\alpha]$, т. е. имеет место сильное перекрытие магнитных подзон, даже при учете лишь первой группы ближайших соседей (см. схему расположения магнитных подзон в правой части рис. 6а). Можно утверждать, что в отличие от двумерного случая, где магнитные подзоны либо касаются, либо разделены запрещенными интервалами, в трехмерной задаче при наличии зависимости энергии от трех проекций квазиимпульса зоны, как правило, перекрываются. Поэтому касание энергетических зон при четных q , обсуждавшееся в разд. 3.2, является, скорее, исключением из общего правила.

На рис. 6 изображены поверхности Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/2$: на рис. 6а показана электронная поверхность Ферми в верхней магнитной подзоне, а на рис. 6б — дырочные поверхности Ферми в нижней подзоне. Поскольку в рассматриваемой ориентации \mathbf{H} область перекрытия двух магнитных подзон не является малой, поверхности на рис. 6 занимают значительную часть зоны Бриллюэна. Из этого следует, что одновалентный металл с ГЦК-решеткой при данной ориентации поля и $p/q = 1/2$, в отличие от случая $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$, остается типичным металлом. Как это следует из (17) и данных рис. 6, в плоскостях, где выражение под знаком модуля в (17) обращается в нуль, имеет место касание электронной и дырочной полостей.

Обсудим теперь спектр системы (16) при значениях магнитного потока, мало отличающихся от $1/2$: $p/q = 1/2 + 1/q'$, где $q' \gg 1$. Здесь необходимо обратить внимание на структуру магнитных подзон в области энергий, которая в квазиклассическом приближении соответствует открытым орбитам. Удобно

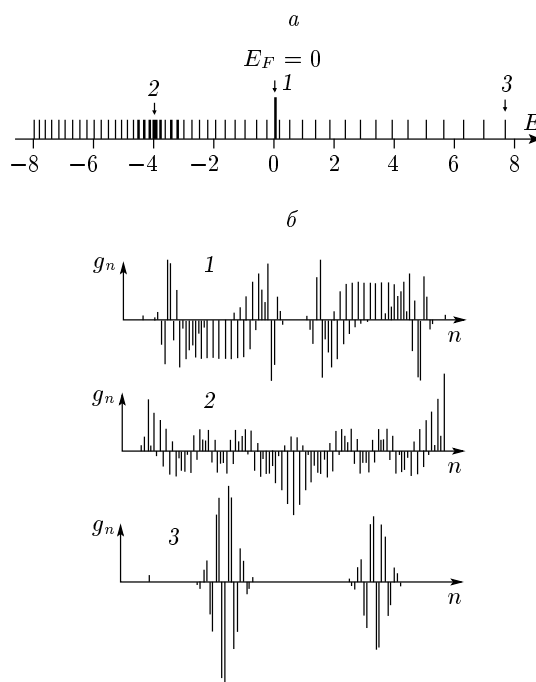


Рис. 7. Спектр (а) и волновые функции (б) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечении $k_3 = 0$. На рис. а отмечены: 1 — уровень Ферми, 2 — уровни в области открытых траекторий вблизи дна верхней магнитной подзоны (17), 3 — уровни в области замкнутых траекторий вблизи потолка верхней магнитной подзоны (17). На рис. б показаны собственные функции, соответствующие энергетическим уровням, выделенным на рис. а, для значений $k_1 = k_2 = 0$

Рис. 6. Электронная (а) и дырочная (б) поверхности Ферми, соответствующие верхней и нижней магнитным подзонам (17), для одновалентного металла при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$ и $p/q = 1/2$. В правой части рис. а представлена схема магнитных подзон и положение уровня Ферми

построить спектр энергий при фиксированном значении k_3 . Такой спектр при значении $p/q = 51/100$ и $k_1 = k_2 = 0$ показан на рис. 7а (сечение $k_3 = 0$) и рис. 8а (сечение $k_3 = 4\pi\sqrt{2}/5a$). На рисунках 7б и 8б приведены несколько собственных функций для уровней, представляющих ту или иную область спек-

тра: функции 1 соответствуют уровню Ферми, 2 — открытым траекториям и 3 — замкнутым орбитам. Сравнивая рис. 7 и 8, можно заметить, что при приближении сечения $k_3 = \text{const}$ к границе зоны Бриллюэна доля значений энергии в непрерывном спектре возрастает, как это и следует из закона дисперсии (17) и рис. 6, где $p/q = 1/2$. В квантовой задаче структура магнитных подзон в области открытых и закрытых орбит является существенно различной. Это хорошо видно на рис. 8а: закрытым орбитам соответствуют экспоненциально узкие энергетические зоны (уровни Ландау в квазиклассическом приближении), расстояния между которыми определяются циклотронной частотой, а открытым орбитам — относительно широкие зоны, разделенные узкими запрещенными интервалами. Нами установлено, что на границе энергий открытых и закрытых орбит ширина магнитной подзоны резко возрастает, а расстояние между подзонами умень-

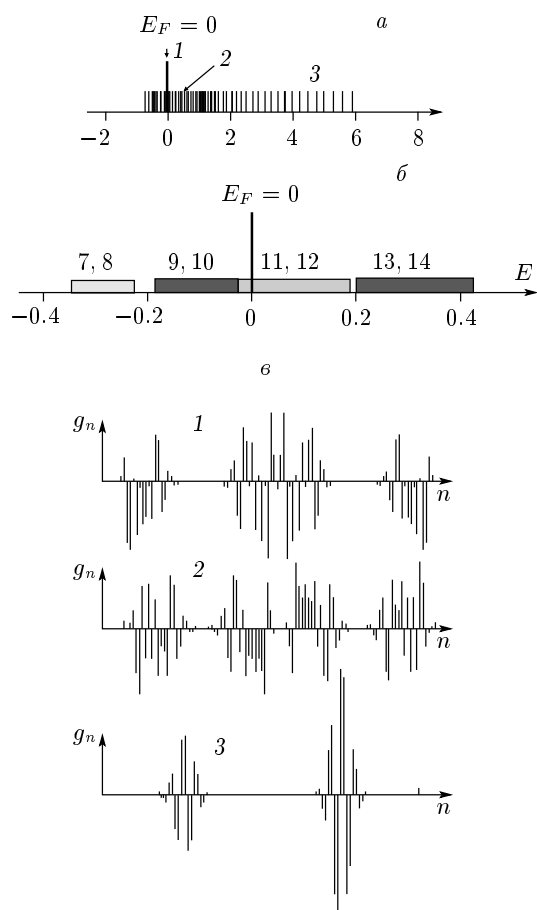


Рис. 8. Спектр (а) и волновые функции (в) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечения $k_z = 4\pi\sqrt{2}/5a$. На рис. а отмечены: 1 — уровень Ферми, 2 — уровни в области открытых траекторий, 3 — уровни в области замкнутых траекторий из верхней магнитной подзоны (17). Магнитные подзоны в области открытых орбит, соответствующих области 1, показаны на рис. б (с указанием их номеров) в увеличенном масштабе при $p/q = 21/40 = 1/2 + 1/40$. На рис. в показаны собственные функции, соответствующие энергетическим уровням, выделенным на рис. а, для значений $k_1 = k_2 = 0$

шается. Такое поведение можно объяснить следующим образом: открытым орбитам соответствуют волновые функции, сильно делокализованные в области одной магнитной ячейки, в то время как закрытым орбитам отвечают локализованные функции (рис. 7б, 8в). Очевидно, что ширина магнитной подзоны определяется вероятностью туннелирования (интегралом перекрытия) между соседними ячейками. Поэтому для делокализованных состояний ширина магнитной подзоны больше, чем для

локализованных. Структура магнитных подзон в области уровня Ферми изображена на рис. 8б. Уровень Ферми лежит в области 11-й и 12-й зон, которые касаются зон 9 и 10. Отметим, что магнитные подзоны расположены парами, что обусловлено описанным выше двукратным вырождением решений системы (16) при четном q .

5. ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И МАГНИТНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

Найденные выше законы дисперсии и поверхности Ферми для ГЦК-решетки, помещенной в сверхсильное магнитное поле, позволяют рассчитать полную энергию электронов проводимости и качественно предсказать характер осцилляций магнитной восприимчивости электронного газа. Отметим две характерные особенности осцилляционных эффектов в сверхсильных магнитных полях.

Во-первых, при изменении магнитного поля в интервале p/q от 0 до 1 должно наблюдаться несколько серий характерных осцилляций магнитной восприимчивости. Эти серии располагаются вблизи простых рациональных p/q с малыми значениями q . В частности, вблизи $p/q = 1/3$ осцилляции будут связаны с прохождением узких магнитных подзон (см. рис. 5) через уровень Ферми, причем период осцилляций будет определяться площадью экстремального сечения $k_z = 0$ поверхности типа (2) на рис. 4. Как уже отмечалось выше, для значения магнитного поля, соответствующего $p/q = 1/2$, поверхность Ферми состоит из малых электронной и дырочной полостей, показанных на рис. 3. Экстремальными являются сечения $k_z = \pm\pi/a$, площадь которых значительно меньше, чем, например, площадь «пуза» (сечение поверхности Ферми одновалентного металла плоскостью, проходящей через начало координат). Поскольку расстояние между двумя полостями поверхности Ферми мало, можно ожидать значительного влияния магнитного пробоя на форму и частоту осцилляций. Подобная ситуация в квазидвумерных органических проводниках обсуждалась в работах [9, 10].

Во-вторых, в каждой серии осцилляций будет иметь место эффект уширения уровней, что приведет к ослаблению амплитуды осцилляций и относительному уменьшению вклада высоких гармоник. Для количественного расчета этого эффекта воспользуемся тем обстоятельством, что в магнитном поле $p/q = 1/q'$, где $q' \gg 1$, ширина магнитной подзоны $\Delta E_n \ll \hbar\omega_c$. Здесь $\omega_c = eH/mc$,

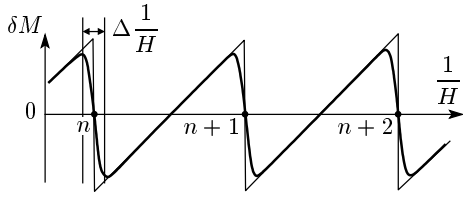


Рис. 9. Осцилляции намагниченности в слое δk_z без учета (пилообразная кривая) и при учете (гладкая кривая) конечной ширины магнитных подзон

а $m = (1/2\pi)\partial S/\partial \varepsilon$, где $S(\varepsilon, k_z)$ — площадь, ограниченная квазиклассической траекторией в сечении $k_z = \text{const}$. Воспользуемся простой моделью спектра в n -й трехмерной магнитной подзоне: $\varepsilon_n(k_x, k_y, k_z) = \varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y) + \hbar^2 k_z^2/2m$, где $\varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y)$ — энергетический спектр в n -й двумерной магнитной подзоне, и предположим, что $T = 0$. Будем считать, что центр магнитной подзоны $\varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y)$ в области указанных полей совпадает с положением n -го уровня Ландау $\hbar\omega_c(n + 1/2)$. При изменении магнитного поля число магнитных подзон может изменяться быстро, но все они группируются вблизи уровней Ландау. При этом можно пренебречь тонкой структурой этих подзон и говорить об уширении n -го уровня, которое остается приблизительно постоянным и равным ΔE_n . Такая картина спектра в слабых полях является типичной для любых моделей спектра блоховских $2D$ -электронов в слабом магнитном поле.

Как известно [24], магнитный момент системы электронов с эквидистантными уровнями Ландау в слое толщиной δk_z вблизи некоторого k_z равен

$$\delta M = -\frac{\varepsilon'_F}{H}(n - n_0),$$

где $\varepsilon'_F = \varepsilon_F - \hbar^2 k_z^2/2m$, а $(n - n_0)$ представляет собой разность населенности слоя δk_z в данном поле H и в нулевом поле. В отсутствие уширения уровней Ландау δM является периодической функцией $1/H$ с периодом $e\hbar/mc\varepsilon'_F$, зависящим от k_z . При значениях H , определяемых условием $\hbar\omega_c(n + 1/2) = \varepsilon'_F$, когда высший уровень Ландау проходит через ε'_F , концентрация электронов в слое δk_z меняется скачком на величину $(eH/4\pi^2 c\hbar)\delta k_z$, а намагниченность δM терпит разрыв со скачком $(e\varepsilon'_F/4\pi^2 c\hbar)\delta k_z$ (пилообразная кривая на рис. 9).

В том случае, когда система дискретных уровней Ландау переходит в систему узких магнитных подзон, характер зависимости δM от $1/H$ изменяется. Это связано с тем, что с ростом поля очередная магнитная подзона освобождается от элек-

тронов не мгновенно, а на интервале ΔH , где $\Delta H/H = \Delta E_n/\hbar\omega_c$, в котором данная подзона проходит через ε'_F . При этом ход кривой $\delta M(1/H)$ определяется плотностью состояний в подзонах, сгруппированных вблизи уровня Ландау. Качественный ход намагниченности в этом случае показан на рис. 9. Область перехода соответствует прохождению через ε'_F подзоны с номером $n, n + 1, n + 2, \dots$. Очевидно, гладкость функции $\delta M(1/H)$ приводит к качественному изменению характера фурье-спектра осцилляций, а именно, к подавлению высших гармоник. В эксперименте должны наблюдаться осцилляции с периодами, определяемыми условием $\partial \varepsilon_n/\partial k_z = 0$, что в рассматриваемой модели соответствует значению $k_z = 0$.

В заключение настоящего раздела вычислим полную энергию электронного газа, что позволит нам определить постоянную составляющую магнитного момента. Расчет проведем при нулевой температуре, поскольку в сильном магнитном поле $kT \ll \hbar\omega_c$. Мы рассмотрим случай, когда поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$, и пренебрежем вторым слагаемым в (9), которое дает малые поправки к полной энергии электронного газа. Значения полной энергии в безразмерных единицах представлены ниже:

$p/q:$	0	1/4	1/3	1/2	2/3	3/4	1
$E:$	-163	-170	-173	-200	-173	-170	-163.

Эти данные свидетельствуют о том, что в магнитных полях p/q и $1 - p/q$ полная энергия электронов одинакова, причем на интервале p/q от 0 до 1/2 происходит уменьшение энергии с ростом поля. Факт уменьшения полной энергии в сильном поле связан с сильной перестройкой спектра (ср. (9) и (10)). При $p/q = 1/2$, когда $E_F \approx 0$, максимум плотности состояний находится при $\varepsilon < 0$, при этом $E_F \approx 0$, в то время как в нулевом поле плотность состояний для закона дисперсии (9) максимальна при $\varepsilon > 0$, а $E_F \approx 1$. Это и приводит к уменьшению полной энергии на интервале p/q от 0 до 1/2. Минимум достигается при $p/q = 1/2$, т.е. когда число квантов магнитного потока, пронизывающего элементарную ячейку, равно степени заполнения ν электронами объема зоны Бриллюэна. Так как при $p/q = \nu = 1/2$ плотность состояний на уровне Ферми мала и плавно изменяется с энергией, можно ожидать, что вблизи минимума кривая $E(H)$ ведет себя плавно. Этим трехмерная задача отличается от двумерной [25], где в области минимума производная dE/dH терпит разрыв. Подобный результат был получен в работах [15, 16], в которых рассматривалась задача о блоховском $3D$ -электроне в простой кубической решетке, помещенной в магнитное

поле с различными ориентациями. Отметим, что в задаче о блоховском $2D$ -электроне в магнитном поле локальный минимум энергии также имеет место при условии $\nu = p/q$ [25], когда на каждый электрон приходится один квант магнитного потока. В $3D$ -задаче подобная интерпретация невозможна. Понижение полной энергии и, в частности, наличие минимума в сильном магнитном поле в $3D$ -кристалле свидетельствует о том, что одновалентные диамагнитные в слабых полях металлы с ГЦК-решеткой (Cu, Ag, Au) в сверхсильном поле становятся парамагнитными. Действительно, при абсолютном нуле температуры постоянная часть магнитного момента на интервале p/q от 0 до $1/2$ положительна:

$$M = -\frac{\Delta E}{\Delta H} > 0,$$

т. е. электронный газ является парамагнитным. Абсолютное значение восприимчивости, определяемой как $\kappa = M/H$, по модулю сравнимо с таковым для случая слабого магнитного поля: $\kappa \approx 10^{-6}-10^{-5}$. Заметим, что учет спина вблизи $p/q = 1/2$ в рассматриваемой модели несуществен, поскольку плотность состояний в окрестности уровня Ферми и, следовательно, парамагнетизм Паули минимальны.

6. ВЫВОДЫ

В настоящей работе в приближении сильной связи построено явное выражение для одноэлектронной волновой функции, являющейся собственной функцией оператора магнитных трансляций в $3D$ -кристалле, находящемся в постоянном магнитном поле. Получено трехмерное уравнение типа уравнения Харпера, определяющее амплитуды волновой функции на узлах магнитной ячейки и энергетический спектр в магнитных подзонах. На примере одновалентного металла с ГЦК-решеткой изучена трансформация поверхности Ферми при наложении сильного магнитного поля со значениями числа квантов магнитного потока $p/q = 1/2, 1/3$. Магнитное поле было ориентировано вдоль кристаллографических направлений $(0, 0, 1)$ и $(1, 1, 0)$. Обнаружено сильное влияние величины магнитного поля и его ориентации на топологию поверхности Ферми. Показано, что в направлении $(0, 0, 1)$ при четных значениях q происходит переход типа металл — полупроводник, а при нечетных q верхняя магнитная подзона заполнена примерно наполовину и сохраняются металлические свойства исходного материала.

Обсуждается характер осцилляций де Гааза–Ван Альфена. Показано, что в магнитных

полях, соответствующих значению магнитного потока $p/q + 1/q'$, где p и q простые целые числа, а $q' \gg 1$, должны наблюдаться регулярные серии осцилляций де Гааза–Ван Альфена, подобные магнитным осцилляциям в слабых полях при $p/q \ll 1$. Рассмотрено влияние уширения уровней Ландау на спектр магнитных осцилляций. Исследована зависимость полной энергии от величины магнитного поля, направленного вдоль $(0, 0, 1)$, и обнаружен минимум при $p/q = 1/2$. Это свидетельствует о том, что электронный газ в кристалле, находящемся в магнитном поле, может проявлять не только диамагнитные, но и парамагнитные свойства.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 01-02-17102), Министерства Образования РФ (Е00-3.1-413), а также Министерства образования РФ и фонда CRDF (проект REC-001).

ЛИТЕРАТУРА

1. B. A. Boyko, A. I. Bykov, M. I. Dolotenko et al., Book of abstracts, *VIII Int. Conference on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics*, Tallahassee, USA, p. 149.
2. P. G. Harper, Proc. Phys. Soc. (London) A **68**, 874 (1955).
3. Г. Е. Зильберман, ЖЭТФ **32**, 296 (1957); **34**, 515 (1958).
4. М. Я. Азбель, ЖЭТФ **46**, 929 (1964).
5. D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).
6. В. Я. Демиковский, А. А. Перов, ЖЭТФ **87**, 973 (1998).
7. V. Ya. Demikhovskii and A. A. Perov, Phys. Low-Dim. Structures **7/8**, 135 (1998).
8. H. Silberbauer, J. Phys.: Condens. Matter **4**, 7355 (1992).
9. P. S. Sandhu, Ju. H. Kim, and J. S. Brooks, Phys. Rev. B **56**, 11566 (1997).
10. S. Y. Han, J. S. Brooks, and Ju. H. Kim, Phys. Rev. Lett. **85**, 1500 (2000).
11. D. Weiss, M. L. Roukes, A. Mensching et al., Phys. Rev. Lett. **66**, 27 (1991).
12. T. Schlösser, K. Ensslin, J. P. Kotthaus et al., Semicond. Sci. Technol. **11**, 1582 (1996).

13. D. Peter, D. Mayou, and M. Cyrot, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 386 (1990).
14. G. Montambaux and M. Kohmoto, *Phys. Rev. B* **41**, 11417 (1990).
15. H. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Jap.* **59**, 4384 (1990).
16. Z. Kunszt and A. Zee, *Phys. Rev. B* **44**, 6842 (1991).
17. V. Ya. Demikhovskii, A. A. Perov, and D. V. Khomitsky, *Phys. Lett. A* **267**, 408 (2000).
18. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
19. R. E. Peierls, *Z. Phys.* **80**, 763 (1933).
20. J. Zak, *Phys. Rev. A* **134**, 1602, 1607 (1964).
21. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, Москва (1978).
22. А. Крэкнелл, К. Уонг, *Поверхность Ферми*, Атомиздат, Москва (1978).
23. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, Москва (1986).
24. Ч. Киттель, *Квантовая теория твердых тел*, Наука, Москва (1967).
25. Y. Hasegawa et al., *Phys. Rev. B* **41**, 9174 (1990).