

Топология и физика твердого тела*

(Обзор)

А.М. Косевич

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: kosevich@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 7 июля 2003 г.

Обсужден топологический аспект динамики электронов в кристалле (зонных электронов) и колебаний кристаллической решетки (фононов). Основные особенности динамики электронов проводимости в металлах связаны с формой их поверхности Ферми, которая отличается от поверхности для свободных электронов. Продемонстрировано, что поведение зонных электронов под влиянием внешних электрических и магнитных полей сильно зависит от топологии поверхности Ферми. Приведены и обсуждены различные примеры такой зависимости (вычисление периодов квантовых осцилляций, магнитный пробой, особенности магнитосопротивления, блоховские осцилляции). Особенности динамики фононов проявляются в сингулярностях плотности колебательных состояний (сингулярности ван Хофа), непосредственно связанных с изменением топологии изочастотных поверхностей. Обращено внимание на наличие топологического инварианта, изменяющегося скачком при изменении топологии изочастотной поверхности. Объяснено происхождение так называемого фазового перехода «двух с половинного рода».

Обговорено топологічний аспект динаміки електронів у кристалі (зонних електронів) та коливань кристалічної ґратки (фононів). Основні особливості динаміки електронів провідності в металах пов'язані з формою їх поверхні Фермі, яка відрізняється від поверхні для вільних електронів. Продемонстровано, що поведінка зонних електронів під впливом зовнішніх електричних та магнітних полів сильно залежить від топології поверхні Фермі. Приведено та обговорено різні приклади такої залежності (обчислення періодів квантових осциляцій, магнітний пробій, особливості магнітоопору, блохівські осциляції). Особливості динаміки фононів виявляються у сингулярностях густини коливальних станів (сингулярності ван Хофа), безпосередньо пов'язаних зі зміною топології ізочастотних поверхонь. Звернено увагу на наявність топологічного інваріанта, що змінюється стрибком при зміні топології ізочастотної поверхні. Пояснено походження так званого фазового переходу «двох з половинного роду».

PACS: 05.45.-a, 45.05.+x

Содержание

1. Введение	136
2. Геометрия и топология поверхностей Ферми электронного газа в металлах	137
2.1. Динамика электронов проводимости и поверхность Ферми	137
2.2. Геометрия поверхности Ферми в кристалле	139
2.3. Квантовые магнитные осцилляции и форма поверхности Ферми	142
2.4. Магнитный пробой	144

* На основе лекций, прочитанных автором на международном совещании Topology in Condensed Matter Physics, Dresden, MPIPKS (13 мая–31 июля 2002).

2.5. Зонные электроны в электрическом поле и блоховские осцилляции	146
2.6. Топология поверхности Ферми и низкотемпературное магнитосопротивление металлов	147
2.7. Фаза Бэрри и топология траекторий в магнитном поле	150
3. Топология характеристических поверхностей в динамике и термодинамике квазичастиц в кристаллах	153
3.1. Геометрия изоэнергетических (изочастотных) поверхностей и асимптотики рассеянных волн.	153
3.2. Плотность колебательных состояний в кристалле и сингулярности ван Хова	157
3.3. Электронный фазовый переход $2\frac{1}{2}$ рода	159
Литература	160

1. Введение

Количественное описание изучаемых процессов и наблюдаемых физических явлений невозможно без использования математических методов. Чем сложнее природа таких явлений, тем более мощные математические методы используются для их описания. Углубление в детализацию физических процессов вынуждает физиков-теоретиков применять все более изощренные методы расчетов.

Но есть разделы математики, помогающие понять не детали физических явлений (что особенно важно при обсуждении конкретных экспериментальных данных), а некоторые общие закономерности, объединяющие физические зависимости, получаемые в большом числе разнообразных экспериментов. Хорошо известным в физике твердого тела примером может служить теория симметрии и теории групп. Они позволяют провести довольно общую систематизацию ожидаемых и наблюдаемых эффектов, не вникая в конкретную запись соответствующих уравнений, а зная лишь симметрию кристаллических тел и набор математических символов (векторы, тензоры и т.п.), используемых для описания обсуждаемых физических явлений.

Примером общего типа утверждений, основанных только на симметричных свойствах, может служить следующее утверждение в динамике любой периодической структуры: частота колебаний любой физической природы (или энергия любых элементарных возбуждений) в такой системе является периодической функцией волнового (или — квазиволнового) вектора с периодом, определяемым структурой обратной решетки и по порядку величины равным $2(\pi/a)$, где a — пространственный период изучаемой системы.

Иного типа общую систематизацию физических явлений в кристаллических телах позволяет произвести другой раздел математики — топология. Хотя топология — наука более молодая, чем физика, ее методы и идеи проникли во многие разделы теорети-

ческой физики и позволили сформулировать довольно важные физические закономерности общего характера. Особенно ценными представляются топологические выводы тогда, когда уравнения физических полей имеют сложную математическую структуру и не допускают простых общих решений. Описания того, как топологические заключения используются в теории поля, теории фазовых переходов, теории сверхтекучих фаз ^3He , нелинейной динамике и т.п. можно найти в книгах [1,2]. Однако когда речь идет о физике конденсированного состояния, то обсуждаются фактически только два аспекта: во-первых, топология параметра порядка в системах, подверженных фазовым превращениям, и, во-вторых, классификация возможных форм таких нелинейных объектов, как солитоны, вихри, дислокации, дисклинации, монополи и т.д.

Мы хотим привлечь внимание к другой точке зрения на проблему, отражающую исходное понимание топологии. С нашей точки зрения (с точки зрения использования топологии в обсуждаемых ниже проблемах), топология относится к геометрии кривых линий (траекторий) и поверхностей. Как же можно систематизировать эти объекты? Кривая линия в $2D$ и $3D$ пространствах может быть либо замкнутой, либо незамкнутой; на замкнутой кривой либо могут быть узлы, либо их нет. Если перечисленные кривые являются классическими траекториями частицы, то квантовые ее свойства будут различными в зависимости от того, к какому классу этих кривых принадлежит траектория. Поверхности ($2D$ многообразия в $3D$ пространстве) могут содержать дыры (разрывы сплошности), а могут быть сплошными; поверхности могут быть замкнутыми (типа сферы), а могут быть открытыми (типа однополостного гиперболоида); поверхности могут быть самопересекающимися. Характеристическими поверхностями в физике твердого тела выступают изочастотные или изоэнергетические поверхности в \mathbf{k} -пространстве; наиболее часто в электронной теории металлов вспоминаются поверхности Ферми. Оказывается,

что изменение топологии изочастотной поверхности (превращение замкнутой поверхности в открытую) при некоторой частоте приводит к появлению особенностей плотности колебательных состояний при этой частоте — особенностей ван Хова. Металлы с поверхностями Ферми разной топологии обладают различными асимптотиками их низкотемпературного магнитосопротивления в сильных магнитных полях.

Существенные успехи в выяснении роли топологических свойств характеристических поверхностей в физике кристаллов были достигнуты благодаря работам И.М. Лифшица и его научной школы (его учеников и последователей). Именно эти работы легли в основу того раздела теоретической физики конденсированного состояния, о котором идет речь в обзоре. Переплетение классических представлений о траекториях частиц, топологических свойств траекторий и изоэнергетических поверхностей, а также квантовой природы законов движения микрочастиц представляется автору наиболее привлекательной частью упомянутых исследований. И хотя первые из цитируемых в обзоре работ были выполнены более полувека тому назад, интересные результаты получены в последние годы, демонстрируя неисчерпаемость проблемы. Автор считает себя прямым учеником И.М. Лифшица и посвящает настоящий обзор памяти своего учителя.

2. Геометрия и топология поверхностей Ферми электронного газа в металлах

2.1. Динамика электронов проводимости и поверхность Ферми

Термины «электронный газ» и «динамика электронов» — это основные понятия того раздела теоретической физики твердого тела, который носит название «*Электронная теория металлов*». В основу построения этой теории положено представление о том, что электропроводность металла и его взаимодействие с электромагнитным полем обусловлены наличием коллектива атомных электронов, который в силу разных обстоятельств ведет себя как газ, способный протекать сквозь кристаллическую решетку. Это представление, сформулированное еще П. Друде, в своей словесной формулировке не изменилось в течение целого столетия. Теперь нам не только понятна в общих чертах причина справедливости такой простой модели, но ясна также и необходимость существенного изменения динамики и кинематики электронов в кристалле по сравнению с таковыми для электрона в вакууме.

Уверенность в успешной применимости модели газа невзаимодействующих электронов связана с

тем, что при низких температурах большая часть электронов, подчиняющихся термодинамическому требованию минимизировать энергию системы, плотно занимает низколежащие уровни энергии, заполняя отдельные состояния попарно (с противоположными спинами) и лишаясь возможности участвовать в любом движении (неизбежно связанном с переходом из одного состояния в какое-то другое). Остальные электроны могут рассматриваться как «вырванные» из этого «мертвого моря» и представляющие фермиевские элементарные возбуждения всей электронной системы. Их совокупность вполне допустимо рассматривать как идеальный газ Ферми. Отнесенная к одной частице энергия, разделяющая занятые и свободные электронные состояния, называется энергией Ферми. В буквальном понимании такое четкое разделение электронных состояний возможно только при абсолютном нуле температур ($T = 0$), но если тепловая энергия электрона (температура T в энергетических единицах) мала по сравнению с энергией Ферми, то возникает узкая область энергий с шириной порядка T вблизи энергии Ферми, в которую попадают лишь частично заполненные электронные состояния. Электроны именно в этих состояниях принимают активное участие во всех процессах, связанных с движением электронов. Чем ниже температура, тем с большей достоверностью можно говорить, что в физических процессах участвуют только электроны с энергией Ферми.

Итак, мы согласились рассматривать электроны с энергиями, близкими к фермиевской энергии, как свободные частицы, образующие идеальный ферми-газ. Основной динамической переменной свободной частицы является ее импульс \mathbf{p} . В квазиклассическом приближении положение электрона в пространстве определяется его координатой \mathbf{x} . Координата \mathbf{x} и \mathbf{p} — это пара канонически сопряженных переменных, задающих мгновенное состояние частицы в классической механике. В отсутствие внешних полей энергия электрона ε зависит только от \mathbf{p} : $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$, и эта зависимость называется дисперсионным соотношением или законом дисперсии. Для свободного электрона $\varepsilon = p^2/(2m_0)$, где m_0 — масса электрона, и мы говорим о квадратичном законе дисперсии. Геометрическим отображением закона дисперсии служит поверхность равных энергий (изоэнергетическая поверхность). Изоэнергетическая поверхность — это поверхность в \mathbf{p} -пространстве, заданная условием

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon = \text{const} . \quad (1)$$

Для свободного электрона — это сфера радиуса $p = \sqrt{2m_0\varepsilon}$.

Поверхностью Ферми называют изоэнергетическую поверхность, отвечающую энергии Ферми ϵ_F . Для газа свободных электронов — это сфера радиуса $p_F = \sqrt{2m_0\epsilon_F}$. При $T = 0$ все состояния внутри поверхности Ферми заняты, поэтому при фиксированном числе электронов объем внутри сферы Ферми, а следовательно, и энергия Ферми ϵ_F однозначно связаны с числом электронов

$$N = 2 \frac{V\Omega(\epsilon_F)}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{8\pi V p_F^3}{3(2\pi\hbar)^3} = \frac{\pi(2m_0)^{3/2}}{3(2\pi\hbar)^3} \epsilon_F^{3/2}, \quad (2)$$

где $\Omega(\epsilon_F)$ — объем в \mathbf{p} -пространстве внутри сферы Ферми, а множитель 2 учитывает два возможных значения спина электрона. Из (2) следует

$$p_F^3 = 3\pi^2 \frac{N}{V} \hbar^3. \quad (3)$$

Если записать $N/V = 1/a^3$, введя среднее расстояние между электронами a , то (3) с хорошей точностью сводится к оценке

$$p_F = \hbar(\pi/a). \quad (4)$$

Заметим, что оценка (4) не содержит никаких параметров закона дисперсии свободного электрона. Это весьма существенное обстоятельство, поскольку возникает вопрос, в какой мере расчет (2), основанный на представлении о газе свободных частиц с квадратичным законом дисперсии, может быть использован при обсуждении свойств электронов в кристаллическом металле. Ведь в периодической структуре, которой является любой монокристалл, импульс \mathbf{p} перестает быть удобной динамической переменной — его роль исполняет квазиимпульс, и энергия элементарного возбуждения, роль которого мы передали электрону, становится периодической функцией квазиимпульса с периодом обратной решетки. Следовательно, закон дисперсии электрона в металле должен быть более сложной (и обязательно анизотропной) функцией квазиимпульса, а потому поверхность Ферми может приобрести форму, мало похожую на сферу. Тем не менее характерный радиус поверхности Ферми (4) оценен правильно. Дело в том, что при расчете (2) мы интересовались лишь числом занятых электронами состояний, определяемых фактически числом степеней свободы всех электронов. Распределяя отвечающие этим степеням свободы состояния по «ячейкам» фазового пространства, мы заполняли некий объем фазового пространства, инвариантный относительно выбора конкретного описания одночастичных состояний.

Отложим пока вопрос о том, какова и чем определяется форма поверхности Ферми для электронов в кристалле, и обсудим возможные проявления формы изоэнергетической поверхности в динамике

электронов. Оказалось, что наиболее чувствительно к этой форме движение электрона в магнитном поле.

Рассмотрим динамику электрона с законом дисперсии $\epsilon = \epsilon(\mathbf{p})$ в однородном магнитном поле \mathbf{B} . Пара гамильтоновых уравнений классической динамики электрона имеет вид

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{e}{c} [\mathbf{v}\mathbf{B}], \quad \mathbf{v} \equiv \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{p}}. \quad (5)$$

Если выбрать ось z вдоль направления \mathbf{B} , то возникнет следующая система уравнений движения:

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{eB}{c} v_y, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{eB}{c} v_x, \quad \frac{dp_z}{dt} = 0, \quad (6)$$

которые обладают двумя интегралами движения

$$\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}, \quad p_z = \text{const}. \quad (7)$$

Пара условий (7) определяет траекторию электрона в \mathbf{p} -пространстве — это кривая пересечения поверхности $\epsilon(\mathbf{p}) = \text{const}$ и плоскости $p_z = \text{const}$ (рис. 1). Из (6) следует, что проекция траектории электрона в \mathbf{x} -пространстве подобна траектории (7). Действительно, перепишем первые два уравнения (6) в виде

$$\frac{dp_x}{dt} = \frac{eB}{c} \frac{dy}{dt}, \quad \frac{dp_y}{dt} = -\frac{eB}{c} \frac{dx}{dt}. \quad (8)$$

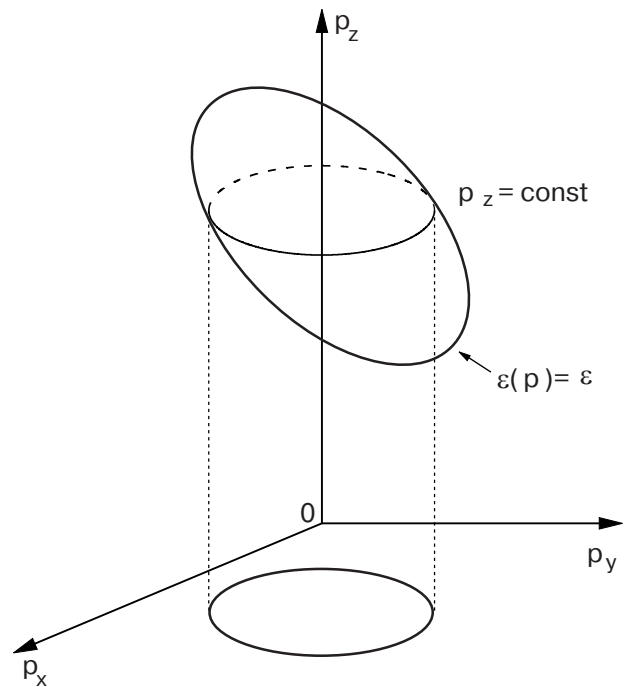


Рис. 1. Траектория электрона в \mathbf{p} -пространстве и ее проекция на плоскость, перпендикулярную магнитному полю.

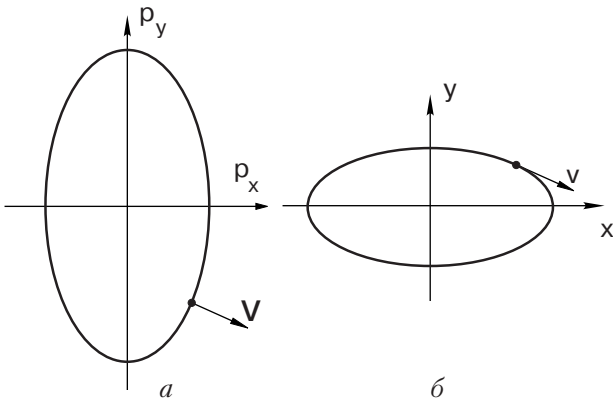


Рис. 2. Траектория электрона в \mathbf{p} -пространстве (а) и \mathbf{x} -пространстве (б).

Соотношения (8) показывают, что проекция траектории в \mathbf{x} -пространстве на плоскость xoy действительно подобна таковой в \mathbf{p} -пространстве, но повернута на 90° относительно координатных осей ox и oy (рис. 2). На рис. 2 отмечены также согласованные направления вектора скорости электрона.

Анализ уравнений движения (6) и рассмотрение рис. 2 приводят к выводу, что электрон совершает циклическое движение в магнитном поле, вращаясь по замкнутой траектории (для свободного электрона это движение по окружности). Легко вычислить частоту этого циклического движения. Из (6) следует, что скорость перемещения электрона вдоль траектории в \mathbf{p} -пространстве равна

$$\frac{dp_l}{dt} = \frac{eB}{c} v_\perp, \quad (9)$$

где v_\perp — проекция скорости электрона на плоскость, перпендикулярную магнитному полю \mathbf{B} . Соотношение (9) порождает цепочку равенств

$$dt = \frac{c}{eB} \frac{dp_l}{v_\perp}, \quad t = \frac{c}{eB} \int \frac{dp_l}{v_\perp}, \quad \Delta t = \frac{c}{eB} \oint \frac{dp_l}{v_\perp}, \quad (10)$$

где интеграл вычисляется вдоль траектории электрона, Δt — период циклического движения электрона, а последний интеграл берется по всей замкнутой траектории. Зная Δt , мы определяем частоту циклического движения электрона: $\omega_c = 2\pi/\Delta t$. Это есть частота циклотронного резонанса в магнитном поле для электрона в кристалле. Но эту частоту принято представлять в виде $\omega_c = eB/mc$, где m — масса электрона. Следовательно, циклотронная масса электрона в кристалле зависит от его траектории и есть функция состояния, а не численная характеристика (как это имеет место у свободного электрона, когда $m_c = m_0 = \text{const}$). Нетрудно выяснить геометрический смысл этой характеристики электрона. Достаточно вычислить изменение пло-

щади, ограниченной электронной траекторией на плоскости $p_z = \text{const}$, при малом увеличении энергии электрона на величину $\delta\varepsilon$:

$$\delta S = \oint \delta p_\perp dp_l = \oint \frac{dp_l}{v_\perp} \delta\varepsilon. \quad (11)$$

Здесь интеграл вычисляется по замкнутой электронной траектории. Сравнивая выражение для Δt в (10) с (11), находим

$$\Delta t = \frac{c}{eB} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}, \quad (12)$$

где функция $S = S(\varepsilon, p_z)$ — это упомянутая площадь на плоскости $p_z = \text{const}$, ограниченная траекторией электрона. Таким образом, эффективная циклотронная масса электрона определяется выражением [3]

$$m_c = m_c(\varepsilon, p_z) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}. \quad (13)$$

В свете изложенного выше, для электронов в металле формула (13) актуальна на поверхности Ферми $\varepsilon = \varepsilon_F$. Это значит, что прямой физический смысл имеет площадь сечения поверхности Ферми плоскостью $p_z = \text{const}$, и ее зависимость от энергии Ферми — производная (13) является экспериментально измеряемой величиной.

2.2. Геометрия поверхности Ферми в кристалле

То обстоятельство, что изоэнергетические поверхности для электронов в кристалле могут иметь форму, сильно отличающуюся от сферической, было очевидным с момента создания электронной теории металлов, о чем свидетельствуют, например, рисунки изоэнергетических поверхностей в известной монографии Бете и Зоммерфельда [4]. Было понятно, что в силу сложной структуры электронного спектра кристаллов возможно существование большого разнообразия самых необычных форм поверхностей Ферми, некоторые из которых были описаны в книге [3]. Но долгое время оставалось неясным, возможно ли хотя бы в общих чертах предсказать форму поверхности Ферми в данном металле. И только наглядные и довольно простые соображения Харрисона [5] позволили пояснить, во-первых, причину появления ожидаемой формы поверхности Ферми для определенного металла и, во-вторых, возможность сосуществования в одном и том же металле нескольких поверхностей Ферми (точнее, нескольких различных полостей много-связной поверхности Ферми).

Проиллюстрируем метод Харрисона на примере $2D$ квадратной решетки, считая ее неким симметричным сечением $3D$ решетки. Элементарную ячей-

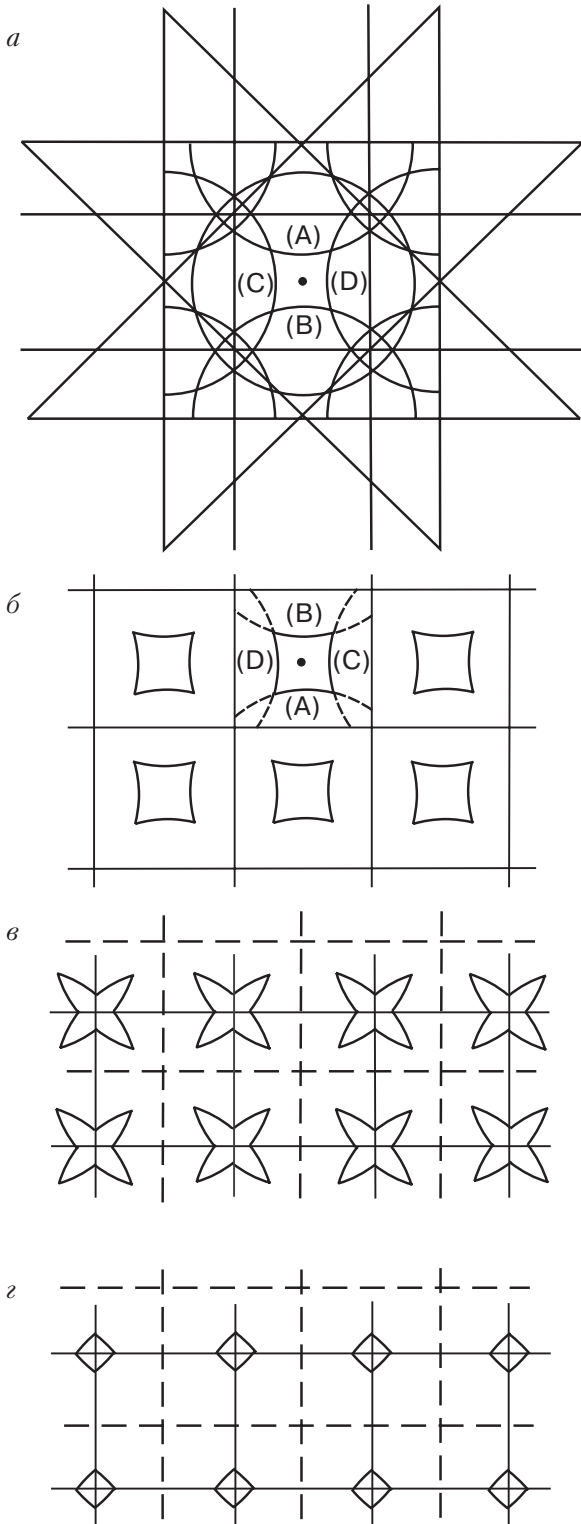


Рис. 3. Построение поверхности Ферми для квадратной решетки: сферы в нулевом приближении (а); листы поверхности Ферми, расположенные в разных зонах Бриллюэна (б, в, з).

ку в обратной решетке обычно выбирают так, чтобы точка $\mathbf{k} = 0$ находилась в ее центре (основной квадрат на рис. 3,а и квадрат на рис. 3,б). Но ее можно выбрать и иначе (штриховой квадрат на рис. 3,в и рис. 3,з). Исходя из плотности электронов в обсуждаемом металле, определим радиус поверхности Ферми (4) (если на каждый атом в кристалле приходится по одному электрону проводимости, то этот радиус имеет порядок величины размера элементарной ячейки). Проведем окружность указанного радиуса вокруг начала координат на рис. 3,а — это будет сечение поверхности Ферми. Учитывая, что энергия электрона в кристалле есть периодическая функция квазиимпульса, такие же окружности следует нарисовать вокруг каждого узла обратной решетки. Тогда возникнет система пересекающихся линий (поверхностей Ферми), где каждая точка пересечения — это некоторая точка вырождения. Ясно, что точки вырождения возникли в силу примитивности модельного предположения о круговой (сферической) форме изоэнергетических поверхностей и должны рассматриваться как результат нулевого приближения. Учет практически любых физических обстоятельств в следующем приближении ликвидирует вырождение, и во всех точках пересечения графики изоэнергетических поверхностей слегка раздвинутся. На плоскости обратной решетки возникнет орнамент из нескольких замкнутых линий. Часть из них удобно расположить в элементарной ячейке первого типа, а часть — в ячейке второго типа. Обычно их относят к разным (первой, второй, третьей и т.д.) зонам Бриллюэна и воспринимают как разные полости поверхности Ферми.

Несколько иная система полостей поверхностей Ферми возникает в анизотропном кристалле (рис. 4). После снятия вырождения, помимо замкнутых

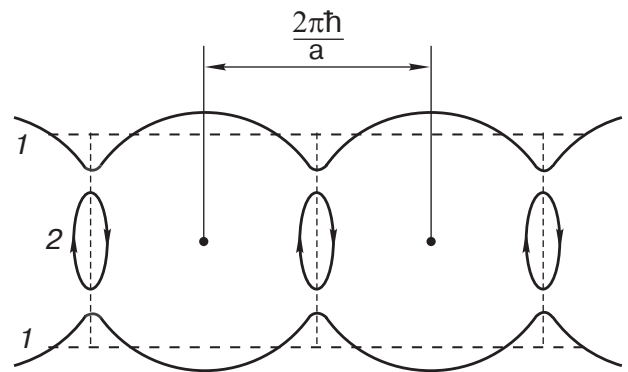


Рис. 4. Два типа электронных траекторий на сильно анизотропной поверхности Ферми: открытые (1) и замкнутые (2).

линий, возникнут линии, пронизывающие всю обратную решетку — это сечения *открытых поверхностей Ферми*. Следовательно, возможно существование двух топологически различных типов поверхностей Ферми: замкнутые и открытые поверхности.

Если плоскость рис. 4 перпендикулярна внешнему магнитному полю, то два типа сечений поверхности Ферми приведут к появлению двух типов траекторий электрона в магнитном поле: замкнутым (типичным для свободного электрона) и открытым, т.е. пересекающим все обратное пространство. Последнее означает, что в обычном координатном пространстве в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, электрон совершает инфинитное движение — уходит на бесконечность. Ясно, что подобная ситуация возможна только для электронов в кристалле и демонстрирует проявление особенностей топологии поверхности Ферми в динамике электронов.

Естественно, что на замкнутых поверхностях Ферми могут возникнуть только замкнутые сечения, поэтому соответствующие электроны будут двигаться в магнитном поле по замкнутым (циклическим) траекториям. На открытых поверхностях Ферми возможны как замкнутые, так и открытые сечения. На рис. 5 показаны разные сечения поверхности, имеющей форму гофрированного цилиндра с осью, направленной вдоль оси op_x . Линии этих сечений определяют траектории электрона с разными значениями величины p_z в магнитном поле. Траектории типа 1 — это открытые траектории, соответствующие инфинитному движению электрона (отвечающие малым p_z), а траектории типа 2 — замкнутые траектории. Два типа траекторий разделены открытой траекторией (*сепаратрисой*), проходящей через седловую точку на поверхности Ферми, а потому обладающей точками самопересечения на границах зоны Бриллюэна. Эти точки являются особыми, так как в них групповая

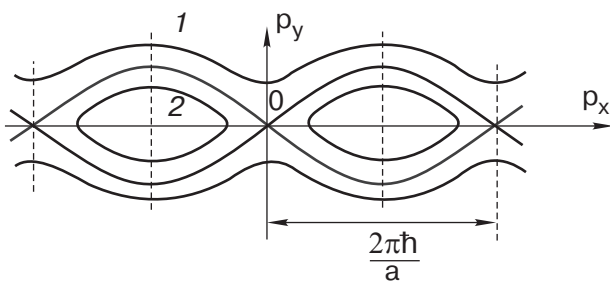


Рис. 5. Различные типы электронных траекторий: открытые (1) и замкнутые (2), соответствующие сечениям поверхности Ферми в форме гофрированного цилиндра плоскостями $p_z = \text{const}$ для различных p_z .

скорость (равная градиенту в \mathbf{p} -пространстве) направлена строго по нормали к плоскости сечения, а следовательно, проекция скорости электрона на эту плоскость обращается в нуль. Электрон в этой точке должен остановиться, но при движении по такой траектории он приближается к седловой точке лишь асимптотически (при $t \rightarrow \infty$). Вынужденная остановка электрона в седловой точке означает, что его масса обращается в бесконечность. С математической точки зрения траектория, проходящая через седловую точку, обладает сингулярной массой.

В предыдущем разделе было показано, что эффективная масса электрона в магнитном поле определяется формулой (13), где S — это площадь сечения изоэнергетической поверхности, как функция энергии ε . Если перейти от энергии Ферми ε_F к энергии $\varepsilon = \varepsilon_F + \Delta\varepsilon$, превышающей ее на величину $\Delta\varepsilon$, то при том же p_z сингулярная траектория сменится близкой к ней замкнутой циклотронной траекторией типа 2. На рис. 6,а показаны участки траекторий разного типа вблизи седловой точки. Особенность траектории второго типа обусловлена наличием близко лежащей седловой точки, поэтому за сингулярность отвечает зависимость от энергии только той части площади ΔS , которая охватывается участком траектории вблизи этой точки. В основном приближении интересующий нас участок циклотронной траектории можно считать гиперболой

$$\frac{p_x^2}{2m_1} - \frac{p_y^2}{2m_2} = \Delta\varepsilon, \quad (14)$$

где $m_i > 0$ ($i = 1, 2$) — характеристики соответствующих кривизн поверхности Ферми (траекторию, проходящую через седловую точку, можно заменить асимптотами гиперболы). Величину ΔS можно вычислить как площадь, ограниченную гиперболой и прямой $p_x = Q = \text{const}$, где Q выбирается на некотором малом (но конечном) расстоянии от седловой точки (см.рис. 6,б). Тогда

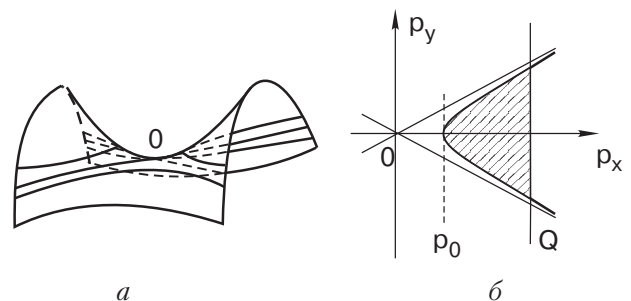


Рис. 6. Траектории электрона в окрестности седловой точки: седловая точка O на поверхности Ферми (а); траектории, близкие к седловой точке (б).

$$\Delta S = 2m_2 \int_{p_0}^Q \left(\frac{p_x^2}{2m_1} - \Delta\varepsilon \right)^2 dp_x =$$

$$= 4\sqrt{m_1 m_2} \Delta\varepsilon \int_1^{x(\Delta\varepsilon)} \sqrt{x^2 - 1} dx, \quad (15)$$

где $p_0 = \sqrt{2m_1 \Delta\varepsilon}$ и $x(\Delta\varepsilon) = Q/\sqrt{2m_1 \Delta\varepsilon}$. Тогда в главном приближении циклотронная масса электрона на траектории, близкой к сингулярной, равна [3]

$$m_c = \frac{(m_1 m_2)^{1/2}}{\pi} \ln \frac{\varepsilon(Q)}{\Delta\varepsilon}, \quad (16)$$

где $\varepsilon(Q) = Q^2/(2m_1)$. Таким образом, при приближении к седловой точке эффективная масса электрона логарифмически возрастает. Следовательно, период обращения электрона в магнитном поле (его циклотронный период) возрастает до бесконечности, и движение по траектории, проходящей через седловую точку, становится сходным с движением по открытой траектории — электрон тратит бесконечное время на прохождение траектории.

2.3. Квантовые магнитные осцилляции и форма поверхности Ферми

К вопросу о форме поверхности Ферми прямое отношение имеет эффект де Гааза—ван Альфена — одно из интереснейших квантовых макроскопических явлений. Он проявляется в осцилляционной зависимости намагниченности металла от напряженности магнитного поля. Обнаруженное в 1930 г. лейденскими физиками, чьи имена вошли в название эффекта, это явление отличается удивительным качеством: эффект де Гааза—ван Альфена во всех подробностях поддается теоретическому осмыслению. Подробное описание истории открытия эффекта, его наблюдения на протяжении многих десятилетий и оценка его роли в экспериментальном определении электронного спектра металлов содержится в монографии Д. Шенберга [6]. Для нас существенно, что это чисто квантовое явление, обусловленное квантованием движения электрона в магнитном поле.

Произведем квазиклассическое квантование движения электрона по замкнутой орбите. Известно, что магнитный поток Φ , охваченный электронной орбитой, квантуется:

$$\Phi = \phi_0 n, \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad \phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e}, \quad (17)$$

где ϕ_0 — квант магнитного потока. Если обозначить A площадь, охваченную проекцией орбиты электрона на плоскость xy , перпендикулярную магнитному полю \mathbf{B} , то можно записать $\Phi = BA$. Но согласно

(8), площадь A пропорциональна площади сечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon = \text{const}$ плоскостью $p_z = \text{const}$:

$$A = \left(\frac{c}{eB} \right)^2 S(\varepsilon, p_z),$$

поэтому возникает следующее правило квантования:

$$S(\varepsilon, p_z) = \frac{2\pi\hbar e B}{c} (n + \gamma), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (18)$$

где γ — параметр, величина которого порядка единицы. Формула (18), впервые предложенная Онзагером [7], дает зависимость энергии электрона от квантовых чисел n и p_z : $\varepsilon = \varepsilon_n(p_z)$, что позволяет построить термодинамику электронного газа в магнитном поле.

Особого изучения требует квантование электронного движения вдоль траекторий, близких к сепаратрисе на рис. 4, или иначе, близких к траектории с самопересечением. Рассмотрим электронные орбиты, в которые трансформируется сепаратриса на рис. 4 либо при небольшом отклонении магнитного поля от оси z , либо при слабом изменении величины p_z . Остановимся на случае, когда возникают две замкнутых траектории, охватывающие сечения поверхности Ферми, типа заштрихованных на рис. 7. Квазиклассическое квантование в таком случае изучалось Азбелем [8]. Если траектории 1 и 2 на рис. 7 имеют близкие участки, то эффективная величина γ сильно зависит от номера n , и вблизи траектории с самопересечением расстояние между уровнями энергии осциллирует при изменении магнитного поля.

В работах Лифшица и Косевича [9] вычислена намагниченность электронного газа при низких температурах и получено выражение для осциллирующей части намагниченности металла. Схематически это выражение может быть представлено в виде

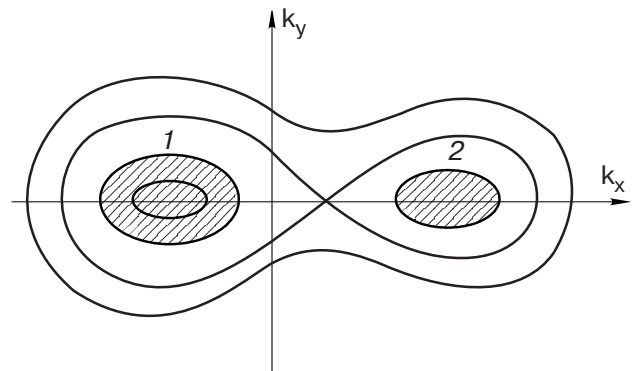


Рис. 7. Магнитные орбиты в окрестности сепаратрисы в форме «восьмерки».

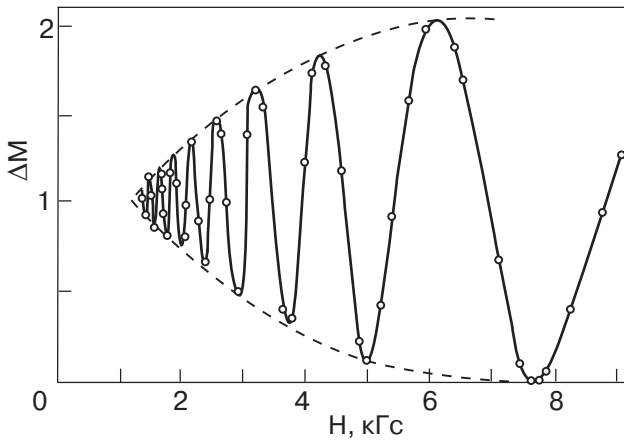


Рис. 8. Осцилляции намагниченности монокристалла Vi (Шенберг, 1938 г.).

$$\Delta M_{\text{osc}} = M_0(B, T) \cos\left(\frac{c\hbar S_m(\epsilon_F)}{eB} - \gamma\right) \cos\left(\frac{\pi g m_c}{2 m_0}\right), \quad (19)$$

где M_0 — плавно зависящая от B амплитуда осцилляций, $S_m(\epsilon_F)$ — площадь экстремального сечения поверхности Ферми плоскостью $p_z = \text{const}$, m_c — эффективная циклотронная масса электрона в металле, m_0 — масса свободного электрона, а g — гиромагнитное отношение, определяющее спиновый магнетон электрона (для свободного электрона $g = 2$). Основная характеристика эффекта де Гааза — ван Альфена — период осцилляций. В обратном магнитном поле он равен

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi|e|\hbar}{cS_m}. \quad (20)$$

Этот период не зависит от магнитного поля (см. рис. 8) и не зависит от температуры (!). В прямом поле при условии $\Delta B \ll B^2$

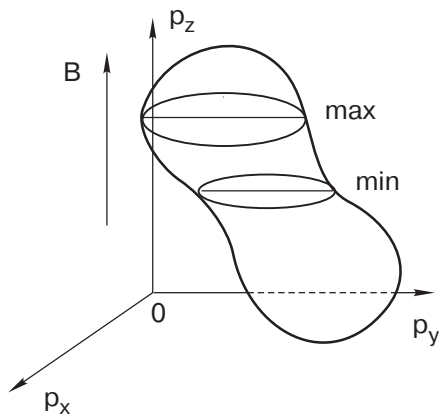


Рис. 9. Два типа экстремальных сечений невыпуклой поверхности Ферми.

$$\Delta(B) = \frac{2\pi e\hbar}{cS_m} B^2, \quad (21)$$

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

Если поверхность Ферми выпуклая, то имеется только одно экстремальное сечение (максимальное). При невыпуклой поверхности их может быть несколько (рис. 9). Следовательно, экспериментально наблюдаемые зависимости для M_{osc} могут иметь вид наложения нескольких осцилляционных кривых.

Многообразие сечений ферми-поверхности, а следовательно, периодов осцилляций, возникает в квазидвумерных проводниках, для которых типичны поверхности Ферми в виде гофрированных цилиндров. Если магнитное поле \mathbf{B} направлено по оси цилиндра, то возможны два типа экстремальных сечений (минимальное и максимальное). Если направление \mathbf{B} отклоняется от оси цилиндра на некоторый угол θ (см. рис. 10), то возникает непрерывный набор сечений, площади которых возрастают с увеличением угла θ . Легко сообразить, что площади экстремальных сечений будут возрастать пропорционально $\text{tg } \theta$ ($0 < \theta < \pi/2$), и это приведет к обратной зависимости от $\text{tg } \theta$ периодов квантовых

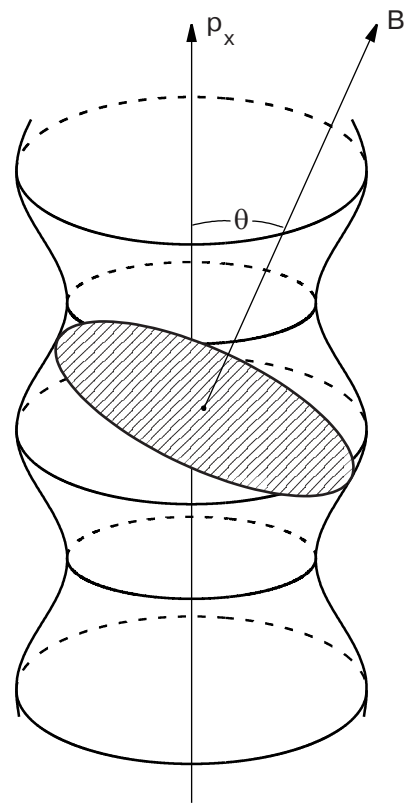


Рис. 10. Сечение поверхности Ферми в форме гофрированного цилиндра в зависимости от направления магнитного поля.

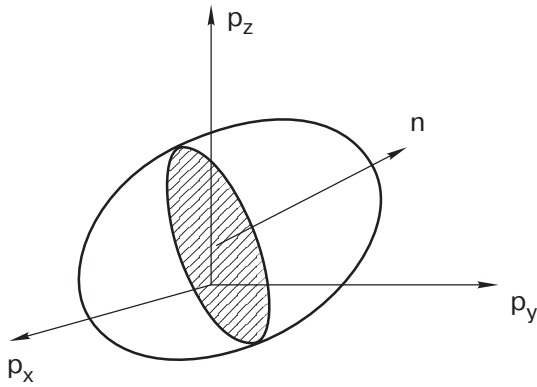


Рис. 11. Сечение поверхности Ферми в зависимости от направления магнитного поля.

осцилляций в обратном магнитном поле (20). При $\theta = \pi/2$ возникает сечение, пронизывающее все импульсное пространство, и его контуром становится открытая траектория типа кривой 1 на рис. 5; соответствующие квантовые осцилляции при этом исчезают.

Амплитуда осцилляций имеет наиболее простую зависимость от T при не очень низких температурах $T > \hbar\omega_c$, где $\omega_c = eB/(m_c c)$ — циклотронная частота, когда

$$M_0 \sim \exp\left(-\frac{2\pi^2 T}{\hbar\omega_c}\right). \quad (22)$$

Итак, три выделенных множителя в (19) дают возможность экспериментально определять три важнейших характеристики электронной системы: а) по периодам осцилляций возможно определить экстремальные сечения поверхности Ферми при разных направлениях магнитного поля («габариты» проекции ферми-поверхности на различные плоскости), б) по температурной зависимости (22) возможно определить эффективные массы электрона на экстремальных траекториях и, наконец, в) последний сомножитель позволяет судить о гиромагнитном отношении для электрона в металле. Все перечисленные возможности с успехом были использованы в многочисленных экспериментах, и формула (19) получила высокую оценку исследователей электронных свойств металлов. Были изучены фермиевские поверхности многих металлов и, основываясь на формуле (19), составлен даже атлас поверхностей Ферми. Впервые такой атлас, подготовленный Ю.П. Гайдуковым, был опубликован в виде приложения в [3]. Д. Шенберг в своей книге [6] назвал (19) формулой Лифшица — Косевича («формула ЛК»), и это название неоднократно повторялось в оригинальных статьях и обзорах, включая книгу [10].

С точки зрения геометрии наиболее интересен пункт а), так как он инициирует постановку вопроса об определении формы поверхности Ферми по набору экстремальных сечений при всевозможных ориентациях секущей плоскости (рис. 11). Этот вопрос был поставлен в виде обратной задачи и решен Лифшицем и Погореловым [11]. Было показано, что если поверхность имеет центр симметрии, и любой луч, исходящий из центра, пересекает поверхность только в одной точке (на поверхности нет складок), то форма поверхности однозначно восстанавливается по зависимости площади центрального сечения от направления нормали к этому сечению. К сожалению, насколько мне известно, этот результат не используется при восстановлении поверхностей Ферми по экспериментальным данным, так как основное внимание исследователей обращено на поиск и идентификацию необычных полостей, ферми-поверхностей, не удовлетворяющих условиям теоремы Лифшица — Погорелова.

Помимо эффекта де Гааза — ван Альфена квантовыми магнитными осцилляциями характеризуется эффект Шубникова — де Гааза — осцилляционная зависимость магнитосопротивления металла от магнитного поля. Поскольку физическая природа последнего эффекта та же самая, измерение магнитосопротивления позволяет получать те же периоды, что и у эффекта де Гааза — ван Альфена [12]. Оказалось, что осцилляции магнитосопротивления легко наблюдаются не только у традиционных металлов, но и органических проводниках (рис. 12), давая возможность изучать их электронные спектры.

2.4. Магнитный пробой

Обсуждая периоды квантовых осцилляций в случае сложной поверхности Ферми, мы исходим из

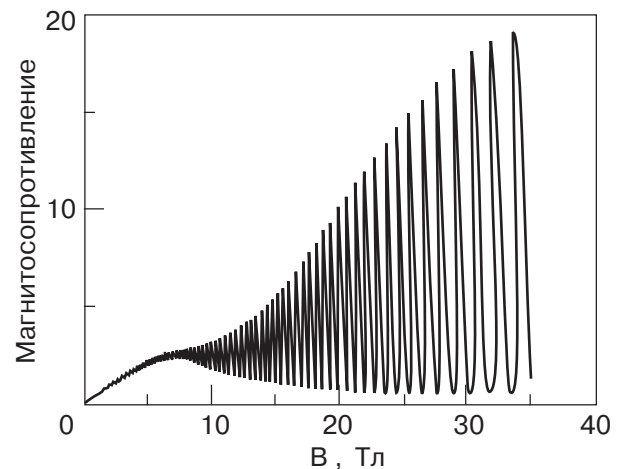


Рис. 12. Осцилляции магнитосопротивления органического проводника α -(ET)₂TlHg(SeCN)₄ при $T = 80$ мК [10].

того, что если имеется несколько разных экстремальных сечений или сечений разных полостей поверхности Ферми, то экспериментальный график представляет собой наложение нескольких независимых кривых с независимыми периодами. Другими словами, предполагается, что движение электрона по каждой из замкнутых орбит, изображенных на рис. 3,б или на рис. 4, совершенно не зависит от наличия близко лежащей траектории другого типа. Но ведь сила Лоренца может привести к переходам с одной траектории на другую. Действительно, такое возможно, если разные классические траектории очень близко подходят друг к другу. Явление, обусловленное подобными переходами, получило название *магнитного пробоя* [13].

Суть магнитного пробоя легко пояснить, изучая рис. 4 и рис. 13. В слабом магнитном поле движение электрона по малой орбите типа 2 на рис. 13 обуславливает эффект де Гааза—ван Альфена с большими периодами. Однако электрон на замкнутой траектории малого размера в некоторые моменты времени оказывается очень близко от открытой траектории типа 1. И если магнитное поле превышает некоторую предельную величину, то электрон в этот момент «по инерции» перескакивает на траекторию 1 (см. рис. 13), а затем, двигаясь по ней, как бы проскакивает короткий участок второй траектории типа 2, выходя в результате на замкнутую траекторию большого радиуса. Это приводит к уменьшению периода квантовых осцилляций.

Можно иначе трактовать результат магнитного пробоя: электрон, двигавшийся по открытой траектории типа 1, пересекающей все обратное пространство, переходит на замкнутую траекторию, площадь которой заштрихована на рис. 13. Следовательно, сильное магнитное поле способно менять не только размеры, но и топологию электронных траекторий.

Ясно, что описанное явление выходит за рамки классической динамики частицы с определенной траекторией. Переход (или не переход) на другую траекторию происходит с некоторой квантовой ве-

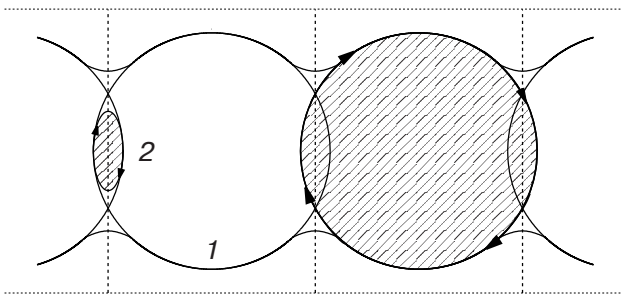


Рис. 13. Схема, поясняющая природу магнитного пробоя: электрон «перепрыгивает» с маленькой орбиты на большую.

роятностью. Поэтому магнитный пробой — довольно сложный квантовый процесс, способный привести к перестройке электронного спектра металла в сильном магнитном поле. Изложение теории магнитного пробоя можно найти в книге [3] и обзорах [14].

Применительно к осцилляционным эффектам магнитный пробой проявляется либо в скачкообразном изменении периода осцилляций при достижении магнитным полем предельной («пробойной») величины, когда электроны «перескакивают» с одной замкнутой траектории на другую, либо в исчезновении осцилляций, если вторая траектория охватывает столь большую площадь, что период осцилляций и его амплитуда становятся исчезающе малыми.

Наличие магнитного пробоя видоизменяет правила квантования (18). Входящая в эту формулу площадь $S(\epsilon, p_z)$ охватывается замкнутой электронной траекторией, расположенной внутри одной элементарной ячейки \mathbf{p} -пространства. В основном приближении, когда справедливо (18), движение по такой траектории автономно и не чувствительно к периодической зависимости энергии от квазимпульса. Однако в схеме расширенных зон аналогичные орбиты имеются во всех ячейках обратной решетки — получающиеся из (18) уровни энергии оказываются непрерывно вырожденными (известен параметр такого вырождения — это одна из координат центра орбиты электрона в \mathbf{x} -пространстве; обозначим ее $y_0 = -cp_x/(eB)$). Основываясь на идеологии магнитного пробоя, следует допустить малую квантовую туннельную связь между движениями по этим орбитам, которая снимет вырождение n -уровней, вытекающих из (18).

Зильберманом [15] на основе других соображений было показано, что учет квантовых поправок к квазиклассическому результату приводит к выводу, что параметр γ в (18) становится зависящим от положения центра орбиты электрона внутри элементарной ячейки металла:

$$\gamma = \frac{1}{2} + \delta\gamma_n(p_x),$$

причем размытие уровня $\delta\gamma$ мало в меру малости отношения постоянной решетки a к минималь-

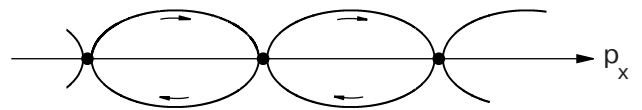


Рис. 14. Цепочка магнитопробойных орбит в сильно анизотропном металле.

ному циклотронному радиусу электрона: $\varepsilon = a\sqrt{eB/(c\hbar)} \ll 1$ (обычно $\delta\gamma \sim \varepsilon^2$).

Влияние эффектов туннелирования на электронный спектр, естественно, усиливается, если обсуждаемые траектории имеют близкие (почти соприкасающиеся) участки. Примером подобной системы может служить цепочка замкнутых электронных траекторий в магнитном поле (рис. 14), связанных центрами магнитного пробоя (маленькие темные кружочки на границах зон Бриллюэна). В терминах магнитного пробоя движение электрона по основному участку орбиты классическое, а в магнитопробойном центре возникает вероятность $w = \rho^2(B)$ протуннелировать на соседнюю замкнутую траекторию. Как было показано ранее [16], обычно

$$\rho = \exp(-B_0/2B) \ll 1,$$

где величину B_0 называют полем пробоя (оно определяется эффективным потенциальным барьером, разделяющим траектории в магнитном поле). Расчет энергии стационарных состояний в цепочке круговых орбит, типа изображенной на рис. 14, с учетом магнитопробойного туннелирования приводит к такому результату [17]

$$\delta\gamma_n = \frac{(-1)^n}{\pi} \arcsin\left(\rho \cos \frac{ap_x}{\hbar}\right),$$

который в случае $\rho \ll 1$ сводится к типичному одномерному закону дисперсии

$$\gamma_n(p_x) = \frac{(-1)^n}{\pi} \rho \cos \frac{ap_x}{\hbar}.$$

Возникающее за счет магнитного пробоя уширение уровней энергии электрона, безусловно, сказывается на амплитуде квантовых осцилляций, приводя к дополнительному ее уменьшению с ростом магнитного поля.

2.5. Зонные электроны в электрическом поле и блоховские осцилляции

Многообразие форм изоэнергетических поверхностей, в частности фермиевских поверхностей, приводящих к особенностям квантовых осцилляций, обусловлено в конечном счете периодической зависимостью энергии зонного электрона от его квазиимпульса. Своеобразное проявление этой зависимости обнаруживается в поведении электрона под действием постоянного однородного электрического поля \mathbf{E} .

В квазиклассическом приближении динамика электрона определяется обычным уравнением

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} \quad (23)$$

с обычным гамильтоновым определением скорости

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{p}}, \quad (24)$$

где $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{G})$, а \mathbf{G} — вектор обратной решетки в \mathbf{p} -пространстве.

Направим вектор \mathbf{E} вдоль оси ox и примем простейшую зависимость $\varepsilon = \varepsilon(p_x)$:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \sin \frac{ap_x}{\hbar}; \quad v = \frac{a\varepsilon_0}{\hbar} \cos \frac{ap_x}{\hbar}, \quad (25)$$

тогда из (23) последует $p_x = eEt$, что сразу дает периодическую зависимость скорости электрона от времени [18]:

$$v_x = v_0(t) \equiv \frac{a\varepsilon_0}{\hbar} \cos(\omega_B t). \quad (26)$$

Частота $\omega_B = eEa/\hbar$ носит название *блоховской частоты*.

Дело в том, что с квантовой точки зрения наличие определенной частоты означает присутствие в спектре электрона дискретных уровней с разностью энергий $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_B$. Чем может быть выделено это значение $\Delta\varepsilon$ в однородном поле? В силу однородности поля никакого выделенного значения \mathcal{E} не существует. Поэтому необходимая дискретность может быть связана только с эквидистантным дискретным спектром типа

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_0 + n\hbar\omega, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Этот эквидистантный спектр и особенно его проявление в оптических экспериментах [19] носит название *лестницы Ванье—Штарка (Wannier—Stark ladder)*. Оказывается, расстояние между «ступенями» этой лестницы в случае электрона в однородном электрическом поле определяет блоховскую частоту осцилляций: $\omega = \omega_B$. Краткое изложение квантовой теории блоховских осцилляций можно найти и обзоре [20].

При разумных значениях электрического поля частота блоховских осцилляций электрона в металле на много порядков меньше частоты столкновений электрона даже в предельно чистых металлах (другими словами, период осцилляций намного превосходит время релаксации в металле τ , и амплитуда блоховских осцилляций намного превосходит длину свободного пробега электрона) [3]. Поэтому при расчете электросопротивления проводников и в других аналогичных случаях периодический характер движения электронов можно не учитывать, принимая, что на малых участках пути электрон движется поступательно. Долгое время считалось, что блоховские осцилляции представляют собой весьма лю-

бопытное, но интересное лишь в теоретическом плане физическое явление.

Ситуация кардинально изменилась, когда была разработана и создана технология изготовления весьма совершенных полупроводниковых сверхрешеток с периодами структуры, намного превышающими постоянную решетки. Так как в таких структурах период обратной решетки сильно уменьшен и энергетический спектр электрона разбит на узкие подзоны, то соответствующие им блоховские осцилляции имеют достаточно высокие частоты (становится достижимым очевидное условие $\omega_B \tau \gg 1$), что делает реальными осуществление таких осцилляций и их экспериментальное наблюдение. Недавно были обнаружены непосредственно блоховские осцилляции электронного тока в объеме полупроводниковых сверхрешеток (первые прямые эксперименты такого типа были выполнены, по-видимому, в работах [21,22]).

На экспериментальную возможность «почувствовать» периодичность энергии электрона в полупроводниковой сверхрешетке впервые обратили внимание Эзаки и Цу [23]. Их соображения и расчет, выполненный в приближении времени релаксации τ , сводятся к следующему. Если бы релаксация не происходила, то зависимость скорости электрона от времени определялась бы формулой (26), где теперь a — период сверхрешетки. Учет диссипативных процессов (релаксации) вынуждает нас считать, что реальное изменение скорости электрона происходит медленнее (демпфируется):

$$dv_x = \exp(-t/\tau) dv_0. \quad (27)$$

Из (27) следует

$$v_x(t) = \int \exp(-t/\tau) dv_0(t) = \int_0^t \frac{dv_0}{dt'} \exp(-t'/\tau) dt'. \quad (28)$$

Таким образом, оказывается

$$\begin{aligned} v_x(t) &= eE \int_0^t \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_x^2} \exp(-t'/\tau) dt' = \\ &= \frac{eE}{m(0)} \int_0^t \cos(\omega_B z') \exp(-z'/\tau) dz', \quad (29) \end{aligned}$$

где $m(0)^{-1} = \partial^2 \varepsilon / \partial p_x^2$ — обратная эффективная масса электрона при $p_x = 0$.

Для больших времен ($t \gg \tau$) можно положить $t = \infty$ на верхнем пределе в (29), и возникает известная формула Эзаки и Цу [23] для установившейся средней скорости электрона в полупроводниковой сверхрешетке:

$$\langle v \rangle = v_x(\infty) = \frac{\omega_B \tau}{1 + (\omega_B \tau)^2} \frac{a \varepsilon_0}{\hbar}. \quad (30)$$

В слабых полях (при $\omega_B \tau \ll 1$) из (30) следует стандартная линейная зависимость средней скорости электрона от поля

$$\langle v \rangle = \frac{e\tau}{m(0)} E, \quad (31)$$

объясняющая электропроводность в слабых электрических полях. В сильном электрическом поле ($\omega_B \tau \gg 1$), допустимом в полупроводниковых материалах, из (30) вытекает невозможная в металлах спадающая с ростом E зависимость средней скорости:

$$\langle v \rangle = \frac{\varepsilon_0}{e\tau} \frac{1}{E}, \quad (32)$$

которая приводит к отрицательной дифференциальной электропроводности полупроводниковой сверхрешетки.

Блоховские осцилляции, как уже отмечалось, возможны на временах, меньших времени релаксации, и в достаточно сильном электрическом поле, т.е. при условии $1/\omega_B \ll t \ll \tau$. В пределе $\tau = \infty$ выражение (29) превращается в формулу (26). При больших, но конечных τ , формула (29) описывает блоховские осцилляции негармонического вида.

Электродинамика полупроводниковых сверхрешеток превратилась в настоящее время в самостоятельный раздел физики [24], содержание которого лишь слегка касается нашей темы.

2.6. Топология поверхности Ферми и низкотемпературное магнитосопротивление металлов

Описанные выше квантовые осцилляционные эффекты в металлах являются, безусловно, очень красивой демонстрацией квантовой природы магнетизма, а разнообразные формы их проявления служат подтверждением сложности поверхностей Ферми в металлах. Однако только замкнутые электронные орбиты дают вклад в наблюдаемые квантовые осцилляции. Мы отмечали, что если при изменении направления магнитного поля орбита электрона на открытой поверхности Ферми становится очень большой и в пределе превращается в незамкнутую, то квантовые осцилляции исчезают. Последнее обстоятельство позволяет определять направление «открытости» ферми-поверхности. Однако специфика динамики электронов при движении по открытым траекториям сказывается при изучении других явлений.

Динамика электронов на открытых траекториях ярко проявляется в особенностях тех макроскопических свойств металлов, которые не требуют для своего описания привлечения квантовой механики частицы с произвольным законом дисперсии, но которые чувствительны к форме классических траекторий носителей тока. Таковыми свойствами являются, в первую очередь, гальваномагнитные свойства металлов в сильных магнитных полях. Топологический аспект теории гальваномагнитных явлений в металлах при низких температурах стал предметом глубокого математического анализа [25].

Однако нас интересуют не детали математического анализа, а физические выводы, связывающие наблюдаемые явления с геометрией поверхностей Ферми.

В настоящее время имеется прекрасный обзор [26], исчерпывающий тему, сформулированную названием настоящего пункта, и это дает автору возможность ограничиться только общими качественными замечаниями. Стоит лишь отметить, что как обзор [26], так и монография [3] дают полное изложение теории низкотемпературных гальваномагнитных свойств металлов в сильных магнитных полях, когда в полной мере проявляются топологические особенности поверхностей Ферми. Эта теория получила в свое время название «теория ЛАК» по первым буквам имен ее создателей Лифшица, Азбеля и Каганова.

Если магнитное поле достаточно сильное, то циклотронная частота столь велика, что при низких температурах электрон за время свободного пробега много раз «обегаёт» любую замкнутую траекторию внутри зоны Бриллюэна, а следовательно, может пересечь много элементарных ячеек в обратном пространстве, двигаясь по открытой траектории. Именно это обстоятельство обуславливает возможность проявления «открытости» электронных траекторий в макроскопических свойствах металла.

Напряженность электрического поля в металле очень мала, поэтому в основном приближении динамика электрона определяется формой его траектории в магнитном поле. Электрическое поле может быть учтено как малое возмущение, перебрасывающее электрон с одной траектории на другую. Исключение представляет ситуация, в которой магнитное поле \mathbf{B} и электрическое поле \mathbf{E} взаимно перпендикулярны. Тогда все электроны на замкнутых траекториях вовлекаются в холловский дрейф с постоянной средней скоростью величины $\langle v \rangle = cE/B$. Несколько иначе выглядит холловский дрейф для электронов на открытых траекториях, но нас в первую очередь будет интересовать не холловский, а диагональный элемент ρ_{xx} удельного электросопротивления

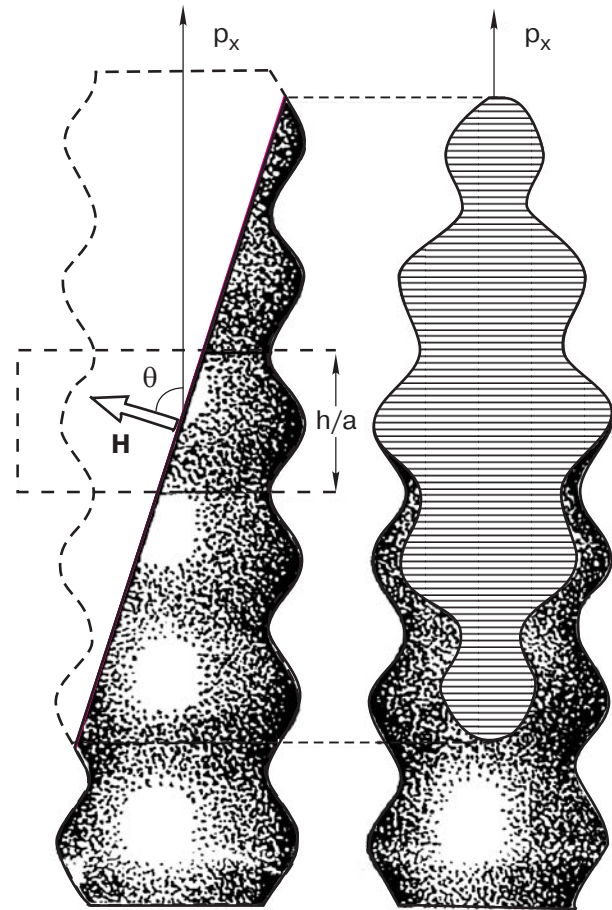


Рис. 15. Длинная траектория на поверхности Ферми в форме гофрированного цилиндра.

как функция направления магнитного поля. Подробный анализ различных ситуаций и разных возможностей, представляемых динамикой электронов на открытых поверхностях Ферми, был дан в работах [27,28] и проанализирован в монографии [29]. Мы ограничимся простейшим вариантом.

Рассмотрим металл, у которого поверхность Ферми — гофрированный цилиндр (типа изображенного на рис. 10 или рис. 15). Модельный закон дисперсии, дающий такую поверхность Ферми, следующий:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \Delta \sin^2 \frac{bp_x}{2} + \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m}, \quad (33)$$

причем $\varepsilon_F > \Delta$. Направление магнитного поля близко к оси z .

Сечение рассматриваемой поверхности Ферми плоскостью $p_z = 0$ представлено на рис. 5. Очевидно, что если магнитное поле строго параллельно оси z , то при $|p_z| < p_1$ возникают открытые траектории. Если же магнитное поле отклонено на конечный угол θ от оси z , то траектории становятся замкнутыми

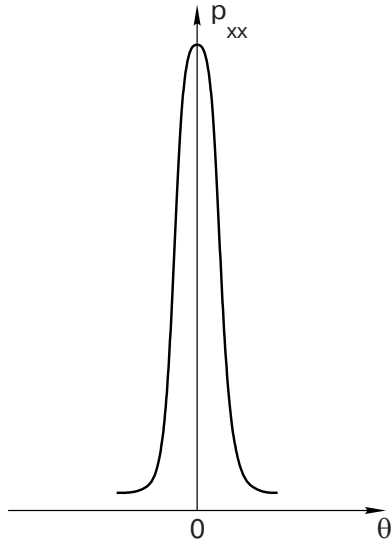


Рис. 16. Сингулярная зависимость магнитосопротивления металла с поверхностью Ферми в форме гофрированного цилиндра от направления магнитного поля.

ми (см. рис. 15). Но при малых углах $\theta \ll 1$ траектории хотя и замкнуты, но очень вытянуты, поэтому длина траектории может значительно превосходить период обратной решетки $2\pi/b$.

Если соответствующая длина траектории в координатном пространстве начнет превосходить длину свободного пробега электрона в металле, то такая траектория будет проявлять себя в кинетике как открытая. Вспоминая соотношение между параметрами электронных траекторий в координатном и обратном пространствах (8), легко оценить предельный угол как то значение, при котором величина $2\pi c/(beV\theta)$ сравнивается со средней длиной пробега электрона. Внутри оцененного интервала углов

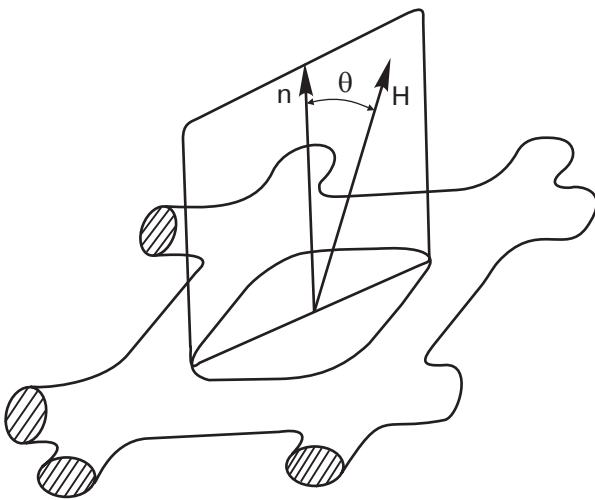


Рис. 17. Открытая поверхность Ферми сложной формы.

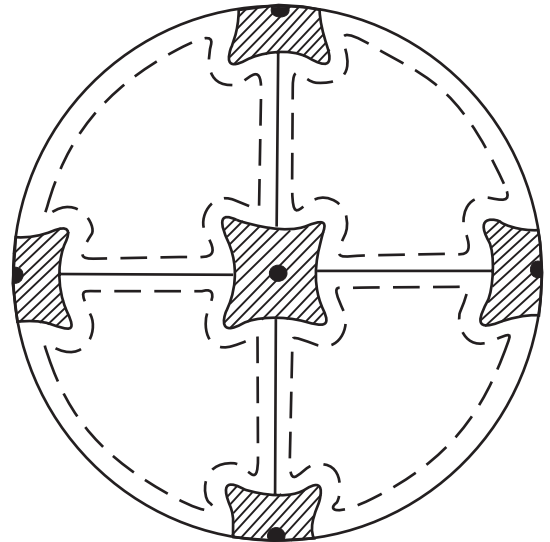


Рис. 18. Стереографическая проекция направлений магнитного поля, для которых возможны открытые траектории.

расположены вытянутые замкнутые орбиты, электроны на которых не успевают реализовать своего циклотронного движения. В результате для этих электронов $\langle v_x \rangle = 0$, в то время как $\langle v_y \rangle \neq 0$. Последнее приводит к резкому возрастанию ρ_{xx} в окрестности $\theta = 0$ (см. рис. 16).

Если поверхность Ферми более сложная, чем гофрированный цилиндр, например, подобна изображенной на рис. 17, то ориентации топологических особенностей могут быть изображены с помощью стереографической проекции (рис. 18). Центр круга соответствует нормали на рис. 17, а граница круга — $\theta = \pi/2$. Заштрихованные участки представляют области, где встречаются открытые траектории. Сплошные линии от центра к границе и сама окружность $\theta = \pi/2$ отвечают открытым траекториям, возникающим, когда поле поворачивается в одной из главных плоскостей. Точки в центре и на окружности соответствуют направлениям, где опять имеются лишь замкнутые траектории; пунктирные линии ограничивают области траекторий, хотя и замкнутых, но продолжающихся на много периодов обратной решетки.

Своеобразное проявление зонного движения электрона в магнитном поле, дающее еще одну возможность изучения геометрии поверхности Ферми, демонстрируют классические размерные осцилляции магнитосопротивления в проводящей сверхрешетке. Если сверхрешетка представляет собой 1D структуру с макроскопическим периодом b вдоль оси x , то в однозонном приближении электрону можно сопоставить закон дисперсии типа (33). Допустим, что внешнее магнитное поле направлено по

оси z , и рассмотрим классические траектории электрона в плоскости xoy . Из всего вышеизложенного ясно, что в динамике электронного газа возникнут резонансные особенности, когда размер фермиевской орбиты электрона по направлению ox в этой плоскости будет кратным периоду b . Соответствующие вычисления низкотемпературного магнитосопротивления подобной системы и библиографию можно найти в работе [30].

Отметим, что описанные классические осцилляции являются аналогом магнитоакустических осцилляций, предсказанных Пипшардом (см., например, [29]). Речь идет о геометрическом резонансе, возникающем при прохождении плоской монохроматической продольной звуковой волны через металл перпендикулярно внешнему магнитному полю. Волна сжатия и разрежения создает движущуюся периодическую структуру. Поскольку скорость электрона значительно превосходит скорость звука, он воспринимает эту волну как некую медленно перемещающуюся сверхрешетку с периодом, равным длине звуковой волны. И совпадение размера электронной орбиты вдоль направления распространения волны с целым числом длин волн приводит к резонансному эффекту. Анизотропия эффекта, связанная с направлением распространения звуковой волны, позволяет судить о форме электронной траектории в магнитном поле.

Дополнительная информация о деталях поверхности Ферми и эффективных массах электрона может быть получена также из анализа циклотронного резонанса Азбеля – Канера [31,32]. Однако этот эффект связан с высокочастотными свойствами металлов, анализу которых следовало бы посвятить отдельную публикацию. Поэтому, понимая огромную важность эффекта Азбеля – Канера в электронной теории металлов, мы ограничимся только его упоминанием.

2.7. Фаза Бэрри и топология траекторий в магнитном поле

Завершая обсуждение проблем, связанных с топологией электронных траекторий в магнитном поле, упомянем сугубо квантовый эффект геометрической фазы Бэрри [33] в осцилляционных магнитных явлениях. Вопрос касается обсуждения параметра γ в формуле (18), влияющего на фазу осцилляций намагниченности (19). Впервые вычисление γ методом ВКБ было проделано в [15], а позже более строго выполнено в [34] для однозонного электронного спектра. В публикации [34] был, в частности, подтвержден особый вклад в γ электронных траекторий с самопересечением (типа сепаратрисы на рис. 5), описанный ранее в работе [8].

Теперь несколько общих слов по поводу обстоятельств, требующих учета фазы Бэрри. Известно, что локальное мгновенное значение фазы волновой функции не измеримо (локально измеримы только ее градиенты и производная по времени). Запишем волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{x}, t) = |\psi| \exp(i\varphi(\mathbf{x}, t)).$$

Предполагается, что $\psi(\mathbf{x}, t)$ — однозначная функция координат и времени. Однако фаза $\varphi(\mathbf{x}, t)$ не обязана быть однозначной, но ее изменение вдоль любого замкнутого контура должно быть кратным 2π . В интересующем нас случае электрона в постоянном магнитном поле, направленном по оси z , когда $p_z = \text{const}$, $\varepsilon = \text{const}$, существенна зависимость фазы от x и y :

$$\varphi = \frac{p_z z - \varepsilon t}{\hbar} + \varphi_0(x, y).$$

Сформулированное выше условие имеет вид

$$\oint \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_\alpha} dx_\alpha = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (\alpha = 1, 2), \quad (34)$$

где интегрирование выполняется вдоль любого замкнутого контура в плоскости (x, y) .

Фаза квазиклассической волновой функции определяется классическим действием S для изучаемой системы $\varphi = (1/\hbar)S$. А так как в магнитном поле действие S приобретает дополнительное слагаемое

$$\delta S_0 = \frac{e}{c} \int_0^{\mathbf{x}} \mathbf{A} d\mathbf{x}, \quad (35)$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал, то замкнутая электронная траектория Γ должна удовлетворять условию, вытекающему из (34):

$$\frac{e}{\hbar c} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} d\mathbf{l} = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (36)$$

Условие (36) эквивалентно квазиклассическому квантованию магнитного потока (16). Именно соотношение (36) лежит в основе эффекта Ааронова – Бома [35] и объясняет квантование циркулярных электронных орбит в поле сингулярного векторного потенциала [36]. Кажущаяся необычность явления заключается в следующем. Бесконечно (в пределе) тонкий прямолинейный соленоид создает вдоль оси z локализованный магнитный поток Φ_0 , а в окружающем пространстве — векторный потенциал \mathbf{A} с единственной отличной от нуля угловой компонентой $A_\theta = \Phi_0 / (2\pi r)$, где $r^2 = x^2 + y^2$. Такой векторный потенциал не порождает магнитного поля в окружающем пространстве ($\text{rot } \mathbf{A} = 0, r \neq 0$). Однако электрон, принудительно

движущийся по замкнутой траектории Γ , охватывающей ось z (например, за счет специального распределения электрического потенциала), «чувствует» наличие магнитного потока, поскольку его траектория подчиняется условию (36).

Это нелокальный топологический эффект. Никакого физического поля магнитного происхождения, локально действующего на электрон в любой точке $z \neq 0$, не существует. «Срабатывает» вся траектория целиком. А особенность упомянутой траектории Γ в том, что вынужденное движение электрона происходит в двухсвязной плоскости (x, y) (ее односвязность нарушена наличием локализованного магнитного потока, «прокалывающего» плоскость в точке $x = y = 0$). Эффект Ааронова – Бома был фактически первой физической реализацией того, что позже стало связываться с проявлением фазы Бэрри.

В работе Бэрри [33] было сделано весьма важное наблюдение, приведшее к открытию с далеко идущими выводами. Пусть гамильтониан и действие изучаемой квантовой системы зависят от некоторого набора непрерывных параметров, который можно назвать *пространством параметров* \mathbf{R} . Тогда фаза волновой функции этой системы также будет зависеть от указанных параметров. Для электрона в кристалле пространством параметров может служить, например, зона Бриллюэна в \mathbf{k} -пространстве [37]. Если параметры \mathbf{R} испытывают адиабатические изменения и медленно меняются со временем $\mathbf{R}(t)$ таким образом, что в конце некоего циклического процесса при $t = T$ возвращаются к исходным значениям $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$, то фаза волновой функции получает дополнительное изменение $\delta\beta$, которое не связано с приращением классического действия. Приращение $\delta\beta$ было названо *геометрической фазой* — это и есть фаза Бэрри. Полный набег фазы вдоль любого замкнутого контура в пространстве параметров должен подчиняться условию типа (34):

$$\delta\varphi \equiv \frac{1}{\hbar} \delta S_0 + \delta\beta = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (37)$$

Нетрудно получить формальное выражение для фазы Бэрри. Пусть $\mathcal{H}(\mathbf{R}(t))$ — гамильтониан, а $|\psi(t)\rangle$ — волновая функция — вектор состояния системы (мы следуем оригинальной работе [33] и пользуемся обозначениями Дирака). Эволюция $|\psi(t)\rangle$ описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \left| \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right\rangle = \mathcal{H}(\mathbf{P}(t)) |\psi(t)\rangle. \quad (38)$$

В фиксированный момент времени находим собственные функции и значения гамильтониана $\mathcal{H}(\mathbf{R})$, где $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$:

$$E_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = \mathcal{H}(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (39)$$

Допустим, спектр $E_n(\mathbf{R})$ дискретный и невырожденный. Согласно квантовой адиабатической гипотезе Эренфеста, система, находившаяся в начальный момент времени в состоянии с n энергетическим уровнем, при адиабатической эволюции продолжает находиться в этом же состоянии, хотя само состояние и уровень $E_n(\mathbf{R})$ меняются со временем. Поэтому волновая функция системы в любой момент времени может быть записана в виде [38]

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' \right) \exp(i\beta_n(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle, \quad (40)$$

где первый экспоненциальный множитель — это обычный фазовый множитель. Последний множитель $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ есть однозначная функция параметров $\mathbf{R}(t)$. А естественно появившийся второй экспоненциальный множитель в (40) является основным моментом в анализе, так как фаза $\beta_n(t)$ не обязана быть однозначной функцией $\mathbf{R}(t)$. Поэтому при циклическом процессе может оказаться $\beta_n(T) \neq \beta_n(0)$.

Подставляя (40) в (38), легко получить уравнение для $\beta_n(t)$:

$$\frac{d\beta_n(t)}{dt} = i \left\langle n(\mathbf{R}(t)) \left| \frac{\partial n(\mathbf{R}(t))}{\partial t} \right. \right\rangle. \quad (41)$$

Вычислим приращение β_n при адиабатическом изменении вдоль некоторого замкнутого контура C в пространстве параметров, так что $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$:

$$\beta_n(T) = i \oint_C \left\langle n(\mathbf{R}) \left| \frac{\partial n(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}} \right. \right\rangle d\mathbf{R}. \quad (42)$$

Так как функции $|n\rangle$ нормированы ($\langle n|n\rangle = 1$), то $\langle n|\partial n/\partial t\rangle$ есть чисто мнимая величина, что гарантирует вещественность фазы $\beta_n(T)$. Если принять $\beta_n(0) = 0$, то $\beta_n(T)$ определяет геометрическую фазу, т.е. фазу Бэрри.

Рассмотрим геометрическую фазу для электрона в кристалле, движущегося по некоторой замкнутой орбите Γ в \mathbf{k} -пространстве. Как отмечалось выше, зона Бриллюэна в этом случае может выступать как пространство параметров, причем $\mathbf{R} = \mathbf{k}$.

Пусть в момент времени t электрон обладает энергией из s -й зоны. Тогда его волновая функция имеет вид (возвращаемся к обычной записи волновой функции)

$$|s\rangle = u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}), \quad (43)$$

где $u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ — периодическая в пространстве блоховская амплитуда. Блоховская амплитуда и энергия электрона $\varepsilon_s(\mathbf{k})$ являются собственными функция-

ми и собственными значениями стационарного уравнения типа (39) в момент времени t . Квазиволновой вектор \mathbf{k} входит в это уравнение как параметр. Например, в магнитном поле $\mathbf{k}(t) = \mathbf{k} - (e/\hbar c)\mathbf{A}(t)$. Поэтому при адиабатическом изменении физических условий следует полагать

$$|s, t\rangle = u_{s\mathbf{k}}(t) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{x}), \quad (44)$$

считая, что квазиволновой вектор в экспоненциальном множителе $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{x})$ является независимым от времени. Медленная зависимость от времени содержится в блоховской амплитуде и энергии $\varepsilon_s(\mathbf{k}(t))$. Учитывая последнее замечание, подставим (44) в (42):

$$\beta_n(T) = i \oint_{\Gamma} d\mathbf{k} \int u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \frac{\partial u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{k}} d^3x. \quad (45)$$

Это и есть геометрическая фаза электрона, совершающего циклическое движение в магнитном поле. Любопытно заметить [34], что интеграл

$$\Omega(\mathbf{k}) = i \int u_{s\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \frac{\partial u_{s\mathbf{k}}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} d^3x \quad (46)$$

совпадает с диагональным элементом матрицы

$$\Omega_{ss'}(\mathbf{k}) = i \int u_{s\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{k}} u_{s'\mathbf{k}}(\mathbf{x}) d^3x, \quad (47)$$

которая определяет так называемую периодическую часть оператора координаты в \mathbf{k} -представлении, ответственную за межзонные переходы (см., например, [39]):

$$\hat{\mathbf{r}} = i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} + \hat{\Omega}(\mathbf{k}). \quad (48)$$

Таким образом, можно считать, что фаза Бэрри привлекла внимание ко второму слагаемому в операторе координаты (48) в пространственно-периодической структуре.

Наконец, вернемся к правилам квантования (37) и обсуждению слагаемого γ в формуле (18). Если соответствующие электронные орбиты с разным n в магнитном поле не очень близки друг к другу, а их форма существенно отличается от орбиты с самопересечением, то как показано в [15] и подтверждено в [39], параметр γ всегда имеет значение

$$\gamma = \frac{1}{2}. \quad (49)$$

Именно это значение обычно используется при обсуждении квантовых осцилляций в металлах [6]. Следовательно, при квантовании движения электрона в магнитном поле в указанных выше условиях для величины δS_0 в (37) нужно принять значение

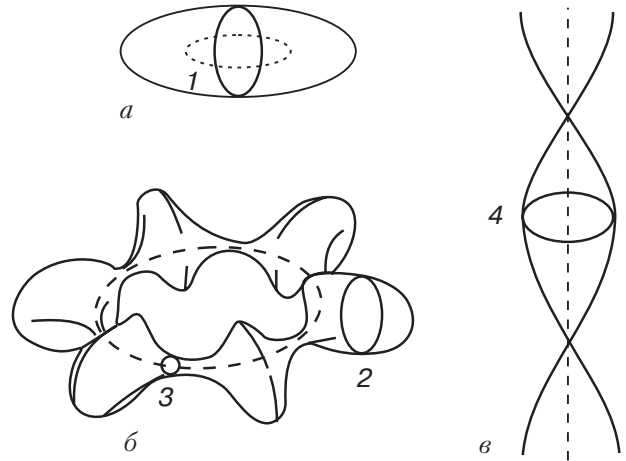


Рис. 19. Схематическое изображение поверхностей Ферми для некоторых металлов, обладающих линиями вырождения в электронном спектре: электронные «линзы» для Zn и Cd (а); дырочный «монстр» для Be и Mg (б); поверхность Ферми с самопересечением для графита (в). Линии вырождения – (---).

$$\delta S_0 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar. \quad (50)$$

Таким образом, постоянная γ в формуле (18) равна

$$\gamma = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \Delta\beta, \quad (51)$$

где $\Delta\beta = \beta(T) - \beta(0)$ есть набег геометрической фазы при полном обороте электрона вдоль его замкнутой траектории в магнитном поле.

Возможность применения формулы (51) и вытекающие последствия обсуждены в работе [40]. Ненулевая фаза Бэрри обычно обусловлена вырождением электронных состояний. Вырождение, т.е. фактически соприкосновение или пересечение изоэнергетических поверхностей (полостей ферми-поверхностей), может быть двух типов: 1) обусловлено симметрией — тогда оно происходит либо в точках симметрии, либо вдоль осей симметрии в зоне Бриллюэна; 2) вдоль линий случайного вырождения [41]. Анализ геометрии поверхностей Ферми показывает, что линии симметричного и случайного контакта должны существовать во многих металлах. На рис. 19 показаны своеобразные формы поверхностей Ферми в разных металлах, обладающие обсуждаемыми особенностями. Для вычисления величины γ воспользуемся результатом, полученным в [42] еще в 1962 г. Оказывается, что если траектория Γ охватывает линию вырождения, то геометрическая фаза $\Delta\beta$ вдоль нее существенно определяется

тем, как зависит энергетическое расщепление от удаления точки \mathbf{k} от указанной линии. Если расщепление энергетических зон растет линейно с увеличением этого удаления, то интеграл (45), дающий геометрическую фазу $\Delta\beta$, равен

$$\Delta\beta = \pm \pi, \quad (52)$$

где знак зависит от направления интегрирования в (45).

Сформулированные условия выполняются в окрестности линии случайного вырождения, а также вблизи линии вырождения, совпадающей с осью симметрии третьего порядка (это траектории 3 и 4 на рис. 19,б,в). Поэтому для указанных траекторий

$$\gamma = 0, \quad (53)$$

$\gamma = 1$ и $\gamma = 0$ эквивалентны.

Если же энергетическое расщепление вблизи линии вырождения увеличивается квадратично с ростом расстояния точки \mathbf{k} от этой линии, то

$$\Delta\beta = 0. \quad (54)$$

Следовательно, в этом случае, а также для траекторий Г, не охватывающих линии вырождения (или охватывающих четное число линий вырождения — это траектории типа 1 и 2 на рис. 19,а,б),

$$\gamma = \frac{1}{2}.$$

Подводя итог, заметим, что описанная роль фазы Бэрри имеет чисто топологический характер и не зависит ни от формы $\epsilon(\mathbf{k})$ в окрестности линии вырождения, ни от размеров траектории Г. Результат зависит только от того, охватывает эта траектория линию сингулярности для блоховской волновой функции (тогда $\gamma = 0$) или не охватывает (тогда имеет место обычное значение $\gamma = 1/2$). Как уже отмечалось, экспериментальное измерение сдвига фазы квантовых осцилляций в металлах, упомянутых выше, позволяет, в принципе, выделять наличие линий вырождения в их энергетическом спектре.

3. Топология характеристических поверхностей в динамике и термодинамике квазичастиц в кристаллах

3.1. Геометрия изоэнергетических (изочастотных) поверхностей и асимптотики рассеянных волн

Обсуждая геометрию и топологию поверхностей Ферми, мы исходим из того, что при низких температурах для фермиевских частиц (а электроны являются примером таких частиц) существенна окрестность одной поверхности — той, которая

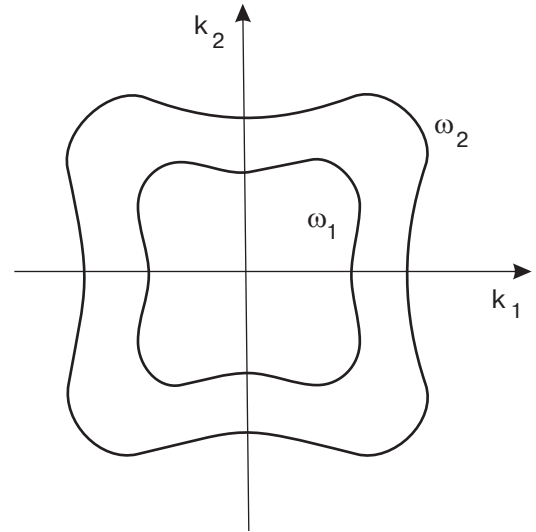


Рис. 20. Сечение невыпуклой изочастотной поверхности для акустических колебаний в кубической решетке.

соответствует энергии Ферми. Для бозевских частиц (такowymi являются фотоны в среде, фононы и магноны) нет единой характерной выделенной энергии (частоты). Поэтому представляет интерес изучение динамики таких частиц (квазичастиц) при всех возможных энергиях. Термодинамика газа подобных частиц весьма чувствительна к температуре, и ее особенности отражают сингулярности плотности состояний бозевских частиц.

Как и в случае электронов, основной динамической характеристикой любых частиц является закон дисперсии, т.е. зависимость энергии частицы ϵ от квазиимпульса \mathbf{p} . В случае фононов обычно рассматривают зависимость квадрата частоты $\epsilon = \omega^2$ от квазиволнового вектора. При этом, естественно, подразумевается, что $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Поскольку особенности проявления сложной формы электронной энергии Ферми довольно подробно обсуждены в 1-й части, сейчас для определенности мы будем говорить о фононах. Как и в случае электронов, все качественные рассуждения удобно связывать с геометрией изочастотной поверхности $\omega(\mathbf{k}) = \omega = \text{const}$. При малых частотах и длинных волнах ($ak \ll 1$), когда закон дисперсии $\omega = ck$, изочастотные поверхности замкнуты. Но поскольку в кристалле скорость звука s зависит от направления волнового вектора \mathbf{k} , то даже при длинноволновых колебаниях поверхность постоянной частоты может быть невыпуклой. Участки, на которых сечение изочастотной поверхности выпукло, отделены от участков, где оно вогнуто, точками с равной нулю кривизной сечения (рис. 20). В трехмерном \mathbf{k} -пространстве выпуклые участки изочастотной поверхности отделены от вогнутых линиями, вдоль которых гауссова (полная) кривизна обращается в нуль. На рис. 21

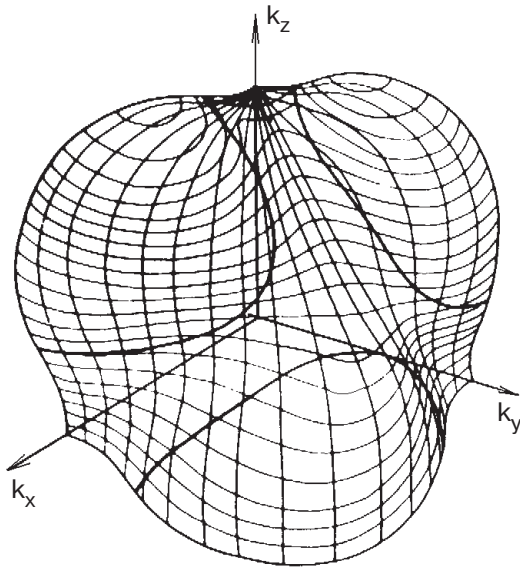


Рис. 21. Изочастотная поверхность для одной из ветвей колебаний кристалла Ge.

изображен один октант изочастотной поверхности монокристалла Ge. Жирные линии на рис. 21 — линии равной нулю гауссовой кривизны, разделяющие выпуклые и вогнутые участки поверхности.

В силу периодичности $\omega(\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k} + \mathbf{G})$, где \mathbf{G} — вектор обратной решетки, описанные замкнутые поверхности должны периодически повторяться в \mathbf{k} -пространстве. На рис. 22, где изображено сечение обратной решетки плоскостью $k_z = 0$, сечения этих поверхностей расположены в точках $k_1 = (2\pi/a_1)n_1$, $k_2 = (2\pi/a_2)n_2$, где $n_1, n_2 = 0, \neq \pm 1, \neq \pm 2, \dots$. Точка $k_1 = \pi/a_1$, $k_2 = \pi/a_2$ отвечает максимальной частоте $\omega = \omega_{\max}$. Изочастотные поверхности вокруг нее

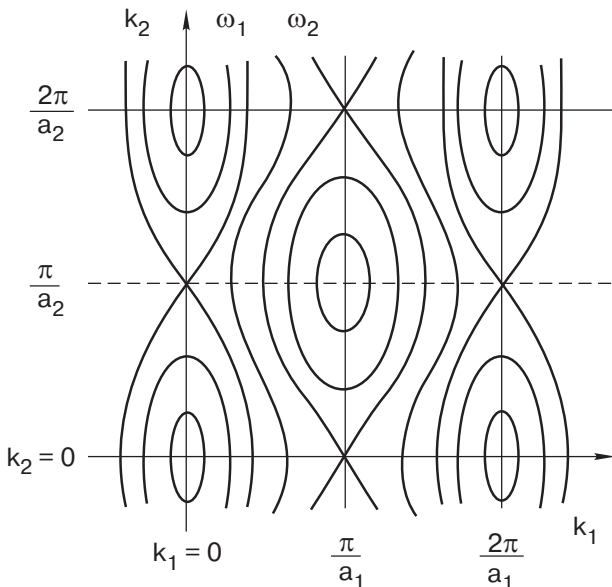


Рис. 22. Схема сечений изочастотных поверхностей плоскостью $k_z = 0$.

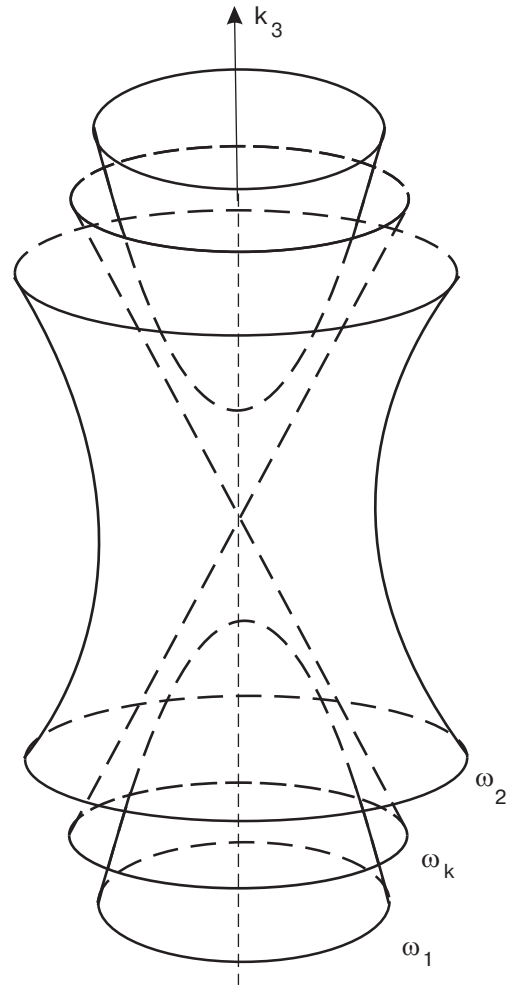


Рис. 23. Вид изочастотных поверхностей вблизи конической точки.

также замкнуты (эллипсоиды). Между двумя типами замкнутых поверхностей расположен слой открытых изочастотных поверхностей ($\omega_1 < \omega < \omega_2$ на рис. 22). Обычно поверхность, разделяющая открытые и замкнутые поверхности, обладает *конической точкой*, в окрестности которой изочастотные поверхности имеют вид как на рис. 23, т.е. подобны гиперboloидам. На схеме рис. 22 конические точки — это точки типа $k_1 = 0$, $k_2 = \pi/a_2$ или $k_1 = \pi/a_1$, $k_2 = 0$.

Форма изочастотной поверхности весьма существенна при изучении распространения квазичастиц. Дело в том, что групповая скорость фонона равна $\mathbf{v} = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$, поэтому ее направление при несферической изочастотной поверхности в общем случае не совпадает с направлением \mathbf{k} . Взаимосвязь направлений геометрически определяется формой изочастотной поверхности $\omega(\mathbf{k}) = \text{const}$, так как вектор \mathbf{v} всегда нормален к поверхности постоянного уровня частоты (см. рис. 24). Каждому волновому вектору \mathbf{k} при фиксированной частоте отвечает одна скорость \mathbf{v} . Однако заданному направлению групповой

скорости \mathbf{v} , т.е. заданному направлению переноса энергии $\mathbf{n} = \mathbf{v}/v$ может отвечать несколько волновых векторов \mathbf{k} (\mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}_3 на рис. 24), т.е. несколько волн с разными направлениями распространения фазы (фронта) волны.

Предположим, что мы изучаем квазичастицу с произвольным законом дисперсии, излученную в начале координат (или рассеянную точечным дефектом в начале координат) и интересуемся ее асимптотикой на больших расстояниях. Впервые такая постановка задачи была предложена И.М. Лифшицем [43], в работах которого было показано, что интенсивность волновой функции в этом случае удобно характеризовать интегралом

$$J(r, \varepsilon) = \oint_{\varepsilon(\mathbf{k})=\varepsilon} \frac{\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) dS_{\mathbf{k}}}{|\nabla_{\mathbf{k}}\omega^2(\mathbf{k})|}. \quad (55)$$

Асимптотическое поведение (55) при $r \rightarrow \infty$ характеризуется следующим. Во-первых, число волн в направлении \mathbf{n} определяется числом точек касания изоэнергетической поверхности плоскостью, перпендикулярной направлению \mathbf{n} (точки \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 и \mathbf{k}_3 на рис. 24). Во-вторых, интенсивность (55) в каждой «опорной» точке \mathbf{v} зависит от полной (гауссовой) кривизны поверхности в этой точке $K_{\mathbf{v}}$ ($K_{\mathbf{v}} = \alpha_1\alpha_2$, где α_1 и α_2 — главные кривизны). Если $K_{\mathbf{v}} > 0$, то соответствующая точка называется *эллиптической*, а если $K_{\mathbf{v}} < 0$, то она называется *гиперболической*.

Все точки выпуклой поверхности эллиптические. Если же поверхность не выпуклая (типа изображенной на рис. 21), то на ней существуют участки с точками разных типов (либо эллиптическими, либо гиперболическими). Но участки изочастотной по-

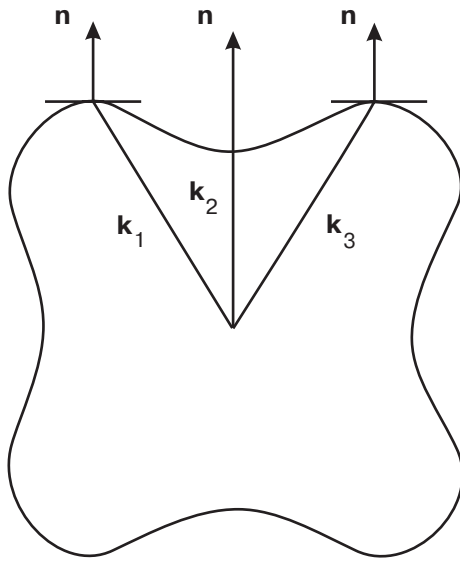


Рис. 24. Опорные точки на изочастотной поверхности, отвечающие направлению \mathbf{n} .

верхности первого и второго типов разделены линиями, вдоль которых один из коэффициентов (α_1 или α_2) обращается в нуль. Это линии так называемых *параболических* точек. Наконец, на пересечении линий параболических точек возникают уплотнения, где $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$.

Начнем с анализа асимптотического вида интеграла (55) в том случае, когда опорные точки суть эллиптические или гиперболические точки. Асимптотическое выражение для (55) в этом случае равно [43]

$$J(r, \varepsilon) = \frac{2\pi}{r} \sum_{\mathbf{v}} \frac{\exp(i\mathbf{k}_{\mathbf{v}}\mathbf{r} \pm i\frac{\pi}{4} \pm \frac{\pi}{4})}{|\nabla_{\mathbf{k}}\varepsilon(\mathbf{k})| \sqrt{|K_{\mathbf{v}}|}}, \quad (56)$$

где знаки в показателе экспоненты определяются знаками главных кривизн α_1 и α_2 . Интенсивность (56) типична для расходящейся сферической волны: $J \sim 1/r$.

Итак, рассеянная волна представляет собой, вообще говоря, суперпозицию нескольких расходящихся волн. Каждая из этих волн имеет свою форму и свою скорость распространения. Представление о пространственном распределении рассеянных волн можно получить, изучая так называемую *волновую поверхность*. Волновая поверхность в координатном пространстве является в определенном смысле полярной по отношению к изочастотной поверхности и строится следующим образом. От положения дефекта (точка O на рис. 25) проводится луч в направлении \mathbf{n} и вдоль него откладывается длина $r = 1/(\mathbf{n}\mathbf{k}_{\mathbf{v}})$, где $\mathbf{k}_{\mathbf{v}} = \mathbf{k}_{\mathbf{v}}(\mathbf{n})$ — опорные точки. Если изочастотная поверхность выпуклая, то имеется

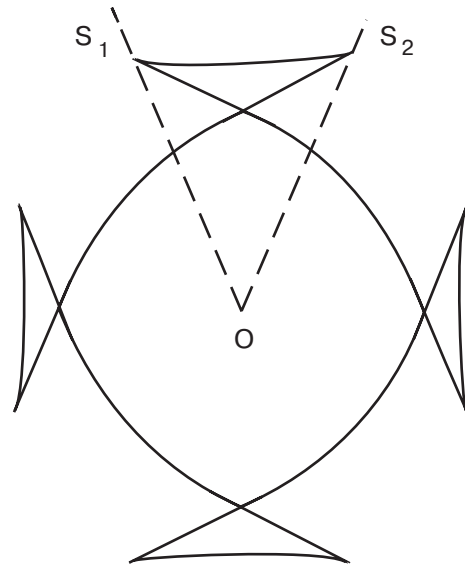


Рис. 25. Сечение волновой поверхности, на которой лучи OS_1 и OS_2 ограничивают «складки».

одна опорная точка с $\mathbf{n}\mathbf{v}_v > 0$. Если изочастотная поверхность невыпуклая, то таких точек может быть несколько. В последнем случае на волновой поверхности возникают «складки» и точки возврата. Касательная плоскость в окрестности каждой опорной точки порождает свой участок волновой поверхности. На границе соседних складок осуществляется переход от областей эллиптических точек к областям гиперболических точек на изочастотной поверхности. Границы являются линиями параболических точек ($K_v = 0$). Всегда имеется непрерывное многообразие направлений (коническая поверхность), отвечающее $K_v = 0$. Эти направления изображены прямыми линиями OS_1 и OS_2 на рис. 25, в точках S_1 и S_2 сливается и обрывается пара участков волновой поверхности. В теории катастроф произведена классификация подобных особенностей и применительно к рассеянию упругих волн в кристаллах выяснено, что возможны только катастрофы типа складок и точек возврата. «Катастрофа» заключается в том, что плотность потока энергии в указанных направлениях, вычисленная формально с помощью (56), обращается в бесконечность ($K_v = 0$). Фактически в этих точках (точнее на соответствующих конических поверхностях) изменяется асимптотическое поведение рассеянной волны — понижается степень расстояния r в знаменателе разложения функции $J(\mathbf{r}, \varepsilon)$.

Рассмотрим для примера простейшую параболическую точку k_0 , в окрестности которой функция $h = \mathbf{k}\mathbf{n}$ имеет разложение

$$h = \mathbf{k}_0\mathbf{n}_0 + \frac{1}{2}\alpha\xi_1^2 + \beta\xi_2^3, \quad (57)$$

где \mathbf{n}_0 — единичный вектор направления, опорные плоскости которого касаются изочастотной поверхности в параболической точке \mathbf{k}_0 (мы выбрали координатные линии ξ_1 и ξ_2 вдоль главных направлений кривизны изочастотной поверхности). В этом случае вместо (56) получаем [44]

$$J(r, \varepsilon) = \frac{\sqrt{6\pi}\Gamma(4/3)}{r^{5/6}} \frac{\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r} \pm i\frac{\pi}{4})}{|\nabla\omega^2(\mathbf{k}_0)||\alpha|^{1/2}|\beta|^{1/3}}. \quad (58)$$

Вычисляя с помощью (58) асимптотику функции Грина, а затем плотность потока энергии, мы обнаружим, что последняя пропорциональна $1/r^{5/3}$. Если на линии параболических точек нет никаких дополнительных сингулярностей, то в среднем по порядку величины $|\alpha|\sqrt{|\beta|} \sim K^*$ — гауссова кривизна в произвольной, ничем не выделенной точке изочастотной поверхности. Поэтому плотность потока энергии вдоль направления \mathbf{n}_0 «катастрофически»

при больших r превышает плотность потока энергии от других точек в отношении $r^{1/3}/|\beta|^{1/6}$.

Однако телесный угол, внутри которого существует эта плотность потока энергии, уменьшается с ростом r . Действительно, рассмотрим рассеянную волну в направлении \mathbf{n} , отклоненном на угол θ_2 (вдоль ξ_2) от \mathbf{n}_0 . Тогда опорная точка сместится на величину $\delta\xi_2$, определяемую соотношением $\theta_2 = 3\beta(\delta\xi_2)^2$. В новой опорной точке гауссова кривизна равна $K = 6\alpha\beta\delta\xi_2$. Сравнивая выражение (56), в котором использована эта гауссова кривизна, с выражением (58) для параболической опорной точки, убеждаемся, что они приобретают одинаковый порядок величины при $\delta\xi_2 \sim 1/(|\beta|r)^{1/3}$. Следовательно, угол, внутри которого «высвечивается» повышенная интенсивность энергии, может быть оценен как $\delta\theta_2 \sim |\beta|^{1/3}/r^{2/3}$. Мы видим, что угол $\delta\theta_2$ уменьшается с ростом r быстрее, чем увеличивается плотность энергии. Поэтому приходящийся на угол $\delta\theta_2$ полный поток энергии падает с расстоянием пропорционально $1/r^{1/3}$, что полностью компенсирует эффект повышения плотности потока.

Наконец, вычислим вклад в интеграл (55), обусловленный точкой уплощения, в окрестности которой имеется разложение

$$h = \mathbf{k}_0\mathbf{n}_0 + \beta_1\xi_1^3 + \beta_2\xi_2^3.$$

Не повторяя вычисления [45], можно сразу записать соответствующую часть интеграла (1):

$$J(r, \varepsilon) = \frac{3\left[\Gamma\left(\frac{4}{3}\right)\right]^2}{r^{2/3}} \frac{\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r})}{|\nabla\omega^2(\mathbf{k}_0)||\beta_1\beta_2|^{1/3}}. \quad (59)$$

В данном случае плотность потока энергии в рассеянной волне превышает таковую в обычных условиях в отношении $r^{2/3}/|\beta_1\beta_2|^{1/6}$. Соответственно раствор телесного угла, в котором сосредоточен поток с такой плотностью, уменьшается с расстоянием пропорционально $|\beta_1\beta_2|^{1/3}/r^{4/3}$.

Наличие линий параболических точек, а также точек уплощения на поверхности постоянной частоты для фононов приводит к явлению *фокусировки фононов*. Явление заключается в том, что точечная генерация фононов в монокристаллическом образце порождает распространение упругих волн, характеризующееся резкой фокусировкой вдоль избранных направлений, обусловленных указанными особыми линиями и точками на изочастотной поверхности. Детальному анализу фононной фокусировки и ее экспериментальной реализации посвящена серия работ Эвери [46], с которым можно познакомиться в книге [47].

Аналогичное явление может наблюдаться при изучении распространения электронов в достаточно чистых металлах (длина свободного пробега электрона должна превосходить, например, толщину металлической пластины). Было предсказано [48], что точечное возбуждение (генерация) электронов на одной поверхности пластины приводит к электронным потокам, которые, будучи детектированными на противоположной поверхности пластины, также характеризуются фокусировкой вдоль подобных же направлений. Фокусировка электронов была обнаружена экспериментально [49].

Любопытно заметить, что фоновые особенности, связанные с формой изочастотных поверхностей, могут проявляться даже в самой низкочастотной (звуковой) области спектра частот. Действительно, при определенных соотношениях между упругими модулями соответствующие сечения акустических изочастотных поверхностей могут быть как выпуклыми, так и невыпуклыми. А свойство выпуклости или невыпуклости этих поверхностей определяет, например, характер убывания с глубиной поверхностных (рэлеевских) волн в кристалле. У обычных рэлеевских волн амплитуда убывает монотонно по мере увеличения расстояния от поверхности. Однако в анизотропной среде, какой является кристалл, амплитуда так называемых обобщенных рэлеевских волн убывает немонотонным (осциллирующим) образом.

Рассмотрим, например, ситуацию, которая легко обсуждается с помощью рис. 24. Допустим, что плоскость рисунка — это центральная секущая плоскость (k_z, k_x) , причем ось oz (нормаль к поверхности) направлена горизонтально, а ось ox вертикально, и поверхностная волна распространяется вдоль этого направления, указанного вектором \mathbf{n} на рисунке. При фиксированной частоте ω векторы \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_3 на рис. 24 указывают точки касания плоскости $k_z = \text{const}$ изочастотной поверхности. Закон дисперсии в окрестности этих точек определяет характер поверхностной волны.

Сечение изочастотной поверхности вблизи точки касания $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ (где \mathbf{k}_0 совпадает с \mathbf{k}_1 или \mathbf{k}_3) может быть представлено в виде

$$k_x = k_x^0 - \alpha^2 (k_z - k_z^0)^2, \quad \omega(k_x^0, 0, k_z^0) = \omega.$$

Поверхностная волна имеет компоненту волнового вектора k_x , несколько превышающую k_x^0 ($k_x > k_x^0$), поэтому

$$k_z = k_z^0 \pm ik, \quad \kappa = \frac{(k_x - k_x^0)^{1/2}}{\alpha^2}.$$

Представляя поверхностную волну в стандартном виде с использованием комплексного значения k_z , видно, что она немонотонно убывает с глубиной (z):

$$u = u_0 \exp [(-\kappa + ik_z^0)z] e^{ik_x - i\omega t}.$$

Поскольку немонотонность полученной зависимости от z однозначно связана с отличным от нуля значением k_z^0 , то невыпуклость сечения изочастотной поверхности является достаточным условием существования обобщенной рэлеевской волны. Детали обсуждения проблемы можно найти в публикациях [50].

3.2. Плотность колебательных состояний в кристалле и сингулярности ван Хова

Распределение колебаний кристалла по частотам удобно характеризовать так называемой плотностью колебаний $g(\varepsilon)$, где $\varepsilon = \omega^2$ (последнее означает, что речь идет о распределении по квадратам частот):

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{(2\pi)^3} \oint_{\omega^2(\mathbf{k})=\varepsilon} \frac{dS_{\mathbf{k}}}{|\nabla_{\mathbf{k}} \omega^2(\mathbf{k})|}, \quad (60)$$

где V — объем кристалла, а интегрируется по поверхности $\omega^2(\mathbf{k}) = \varepsilon$.

Поскольку полоса дозволённых частот ограничена ($0 < \varepsilon < \omega_m^2$ и $g(\varepsilon) \equiv 0$ при $\varepsilon < 0$ и $\varepsilon > \omega_m^2$), то функция $g(\varepsilon)$ теряет аналитичность на краях полосы. При $\omega \ll \omega_m$ в изотропном приближении имеем $\omega^2 = s^2 k^2$, поэтому (60) дает

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{(2\pi)^2 s^3} \sqrt{\varepsilon}, \quad \varepsilon \ll \omega_m^2. \quad (61)$$

При $\omega_m - \omega \ll \omega_m$ обычно можно записать (как вблизи точки максимума функции):

$$\omega^2 = \omega_m^2 - \gamma_1^2 k_1^2 - \gamma_2^2 k_2^2 - \gamma_3^2 k_3^2, \quad (62)$$

где \mathbf{k} отсчитывается от точки в зоне Бриллюэна, где $\omega = \omega_m$. Но так как мы интересуемся топологически эквивалентными ситуациями, можно упростить (62):

$$\omega^2 = \omega_m^2 - \gamma^2 k^2. \quad (63)$$

Подставим (63) в (60):

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{(2\pi)^2 \gamma^3} \sqrt{\omega_m^2 - \varepsilon}, \quad \omega_m^2 - \varepsilon \ll \omega_m^2. \quad (64)$$

Сравнивая (61) и (64), видим, что $g(\varepsilon)$ исчезает на концах полосы собственных частот по сингулярному закону

$$g(\varepsilon) = \text{const} \sqrt{|\varepsilon - \varepsilon^*|}, \quad (65)$$

где ε^* — одна из границ непрерывного спектра квадратов частот.

Помимо границ непрерывного спектра сингулярности плотности состояний появляются при значениях ε , разделяющих поверхность разной топологии. Выше отмечено, что признаком соответствующей поверхности — сепаратрисы служит наличие конической точки. Рассматривая рис. 23, легко заметить, что вблизи конической точки $\omega = \omega_k$ трансформация замкнутых изочастотных поверхностей в открытые происходит непрерывно. Однако важно, что эта непрерывная трансформация сопровождается изменением топологии поверхностей. Но топология поверхности, как и ее симметрия, не может меняться непрерывно. Переход от замкнутых поверхностей к открытым, в принципе, является скачкообразным процессом и потому должен характеризоваться соответствующим изменением некоторого топологического параметра поверхности. Действительно, такой параметр существует, и он называется топологическим инвариантом Эйлера (характеристикой Эйлера).

Топологический инвариант Эйлера для поверхности $\omega(\mathbf{k}) = \omega = \text{const}$ можно представить в виде

$$\chi(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int K(\mathbf{k}) dS_k, \quad (66)$$

где интегрирование производится по всей поверхности; dS_k — элемент площади поверхности и $K(\mathbf{k})$ — ее гауссова (или полная) кривизна в точке \mathbf{k} . Гауссова кривизна определяется через частные производные функции $\omega = \omega(\mathbf{k}) \equiv \omega(k_x, k_y, k_z) = \omega(k_1, k_2, k_3)$ следующей формулой:

$$K(\mathbf{k}) = \frac{1}{v^4} \begin{vmatrix} v_{1,1} & v_{1,2} & v_{1,3} & v_1 \\ v_{2,1} & v_{2,2} & v_{2,3} & v_2 \\ v_{3,1} & v_{3,2} & v_{3,3} & v_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 & 0 \end{vmatrix}, \quad (67)$$

где v_i — вектор групповой скорости, $v_{i,j} = \partial v_i / \partial k_j = \partial^2 \omega / (\partial k_i \partial k_j)$ и $i, j = 1, 2, 3$.

Используя (66) для характеристики изочастотных поверхностей, следует помнить, что они периодически повторяются во всем обратном пространстве. И под топологическим инвариантом мы будем понимать интеграл (66), вычисленный по той части изочастотной поверхности, которая находится в одной элементарной ячейке \mathbf{k} -пространства.

Вблизи конической точки закон дисперсии в простейшем случае имеет вид

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_k + \gamma_1^2 (k_1^2 + k_2^2) - \gamma_3^2 k_3^2, \quad (68)$$

где \mathbf{k} отсчитывается от конической точки. В окрестности этой точки

$$K(\mathbf{k}) = \frac{(\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3)^2 (\omega_k - \omega)}{[(\gamma_1^2 k_1)^2 + (\gamma_2^2 k_2)^2 + (\gamma_3^2 k_3)^2]^2}. \quad (69)$$

В самой конической точке ($\omega = \omega_k$ и $k_1 = k_2 = k_3 = 0$) гауссова кривизна (69) сингулярна, но вне этой точки изочастотные поверхности регулярны и кривизна K не имеет особенностей. Предположим, что другие особые точки на изочастотной поверхности далеки от выделенной конической точки. Тогда при $\omega \rightarrow \omega_k$ особое поведение инварианта $\chi(\omega)$, связанное с возникновением конической точки, должно определяться интегрированием в (66) по малой окрестности рассматриваемой точки.

Имея наглядное представление о поверхностях вблизи конической точки (рис. 23), при $\omega \rightarrow \omega_k$ трудно выполнить вычисления, приведенные в [51]. Они дают для частот $\omega < \omega_k$ (двуполостные гиперболоиды)

$$\delta\chi(\omega) = 1 - \frac{\gamma_3}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_3^2}}. \quad (70)$$

Для частот $\omega > \omega_k$ (однополостные гиперболоиды) получаем

$$\delta\chi(\omega) = -\frac{\gamma_3}{\sqrt{\gamma_1^2 + \gamma_3^2}}. \quad (71)$$

Сравнивая (70) и (71), мы видим, что при наличии конической точки на поверхности постоянной частоты топологический инвариант $\chi(\omega)$ меняется точно на единицу с изменением частоты (за счет каждой конической точки, приходящейся на одну элементарную ячейку обратной решетки).

Возможно, для математиков сформулированное утверждение тривиально, но для физиков важно, что существует определенный топологический инвариант, позволяющий контролировать соотношение между качественными особенностями изочастотных поверхностей и аналитическим модельным их описанием.

Наличие скачка в зависимости $\chi(\omega)$ от частоты, естественно, должно отразиться на аналитических свойствах плотности состояний в окрестности частоты ω_k . Расчет особенностей плотности состояний, порожденных законом дисперсии (68), несложен: соответствующие вычисления приведены в [45,51]. Их итог таков.

Если $\varepsilon_k = \omega_k^2$ — квадрат частоты в критической точке, и значения $\varepsilon < \varepsilon_k$ отвечают замкнутым изочастотным поверхностям, а $\varepsilon > \varepsilon_k$ — открытым, то при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k$ имеем

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} g(\varepsilon_k) - A^2 \sqrt{\varepsilon_k - \varepsilon} + O(\varepsilon_k - \varepsilon), & \varepsilon < \varepsilon_k; \\ g(\varepsilon_k) + O(\varepsilon - \varepsilon_k), & \varepsilon > \varepsilon_k, \end{cases} \quad (72)$$

где $A^2 = \text{const}$, а $O(x)$ определяет малую величину порядка x (при $x \rightarrow 0$).

Частота, дающая корневую особенность типа (72), носит название *аналитической критической точки типа S*. В спектре 3D кристалла существует, по крайней мере, две критические точки типа S. На рис. 22 две сепаратрисы с коническими точками $\varepsilon = \omega_1^2$ и $\varepsilon = \omega_2^2$ ограничивают слой открытых изочастотных поверхностей.

Сингулярности типа S, порожденные изменением топологии изочастотных поверхностей, и особенности на границах сплошного спектра называются *особенностями ван Хова*.

3.3. Электронный фазовый переход $2\frac{1}{2}$ рода

Особенности ван Хова слабо проявляются в термодинамике кристаллической решетки, так как термодинамические характеристики выражаются интегралами по всем частотам, в которых корневые сингулярности плотности состояний не могут привести ни к каким заметным эффектам. Иначе обстоит дело в термодинамике электронного газа в металлах, который при низких температурах обладает характерной энергией — энергией Ферми. И если существуют физические причины того, что энергия сингулярной точки ε_k оказывается близкой к ε_F и зависит от некоторого непрерывного параметра настолько сильно, что разность $\varepsilon_F - \varepsilon_k$ может проходить через нуль, то появляется возможность изменять топологию поверхности Ферми. Тогда при изменении указанного параметра следует ожидать аномалий термодинамических характеристик электронного газа [52].

Таким непрерывным параметром может служить всестороннее сжатие при больших давлениях. Зная о слабой сжимаемости металлов, можно предполагать, что наблюдение эффекта требует огромных давлений. Но можно указать ситуацию, в которой требуемые давления не так уж велики.

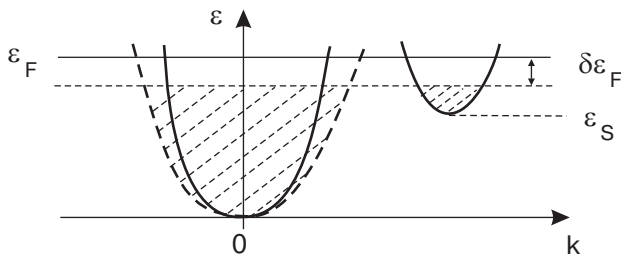


Рис. 26. Схема электронного спектра металла с двумя группами электронов проводимости.

Рассмотрим металл, у которого существует две полости поверхности Ферми: большая и маленькая, т.е. две группы электронов: многочисленная и аномально малая. Такой металл интересен с точки зрения наблюдения эффекта де Гааза — ван Альфена, так как сечения малой полости фермиевской поверхности будут давать большие и легко наблюдаемые периоды квантовых осцилляций. В одноэлектронной схеме энергетический спектр электронов можно характеризовать следующей картинкой [53] на рис. 26. Здесь ε_F — энергия Ферми, равная химпотенциалу ζ_0 , отсчитанному от дна зоны большой электронной группы в отсутствие давления (аналогично $\zeta_s = \varepsilon_F - \varepsilon_s$ — химпотенциал, отсчитанный от дна аномально малой группы электронов ε_s). При малой деформации (сжатии) под всесторонним давлением p смещение $\delta\varepsilon_F$ пропорционально p , причем для основной массы электронов

$$\frac{|\delta\varepsilon_F|}{\zeta_0} \sim \frac{p}{G}, \quad (73)$$

где G — модуль сдвига. Конечно, $p/G \ll 1$, однако в силу аномальной малости второй группы электронов ($\zeta_s \ll \varepsilon_F$) величина $\delta\varepsilon_F$ может сравниться с ζ_s . Во всяком случае изучение эффекта де Гааза — ван Альфена под давлением [54] демонстрирует возможность изменения периодов осцилляций на величину, сравнимую с самим периодом. Но это означает, что при больших, но разумных, давлениях можно добиться условия $|\delta\varepsilon_F| > \zeta_s$. Так как при сжатии кристалла в силу неизменности числа электронов принадлежащий им объем в \mathbf{k} -пространстве расширяется, то следует ожидать $\delta\varepsilon_F < 0$. Следовательно, в момент, когда ε_F опускается ниже ε_s , исчезает малая замкнутая поверхность, а потому в плотности состояний исчезает слагаемое типа (61) с сингулярной зависимостью:

$$g_s(\varepsilon) = \begin{cases} 0, & \varepsilon < \varepsilon_s; \\ VA^2 \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_s}, & \varepsilon > \varepsilon_s, \end{cases} \quad (74)$$

где $A^2 = \text{const}$.

Рассмотрим электронный газ с описанным спектром энергий при абсолютном нуле температуры. Тогда свободная энергия газа равна его внутренней энергии:

$$F(V) = E(V) = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (75)$$

Выделим в (75) ту часть F , которая порождена аномально малой группой электронов:

$$F_s(V) = VA^2 \int_{\varepsilon_s}^{\varepsilon_F} \varepsilon \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_s} d\varepsilon.$$

Давление в системе также включает особую часть:

$$p_s = -\frac{\partial F_s}{\partial V} = \begin{cases} 0, & \varepsilon_F < \varepsilon_s; \\ -A^2 \int_{\varepsilon_s}^{\varepsilon_F} \varepsilon \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_s} d\varepsilon, & \varepsilon_F > \varepsilon_s. \end{cases} \quad (76)$$

Переход из области $\varepsilon_F < \varepsilon_s$ в область $\varepsilon_F > \varepsilon_s$ соответствует появлению новой полости у поверхности $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$. Здесь ε_F есть функция внешнего параметра, определяющего обсуждаемую особенность. В случае всестороннего сжатия этим параметром является объем: $\varepsilon_F = \varepsilon_F(V)$. Поэтому сингулярная часть сжимаемости κ (второй производной свободной энергии) может быть записана в виде

$$\kappa_s = \frac{\partial p_s}{\partial V} = \begin{cases} 0, & \varepsilon_F < \varepsilon_s; \\ -A^2 \varepsilon_F \sqrt{\varepsilon_F - \varepsilon_s} \frac{d\varepsilon_F}{dV}, & \varepsilon_F > \varepsilon_s. \end{cases} \quad (77)$$

Видно, что вторая производная F в точке $\varepsilon_F = \varepsilon_s$ имеет вертикальный излом, а третья обращается в бесконечность как $|\varepsilon_F - \varepsilon_s|^{-1/2}$. Таким образом, при $T = 0$ в точке $\varepsilon_F = \varepsilon_s$ имеется сингулярность, которую по терминологии Эренфеста можно было бы условно назвать фазовым переходом $2\frac{1}{2}$ рода.

Но при $T \neq 0$ особенность при $\varepsilon_F = \varepsilon_s$ размывается, поэтому истинного фазового перехода нет, однако определенная аномалия при $\varepsilon_F = \varepsilon_s$ существует.

Своеобразное проявление электронного топологического фазового перехода реализуется, если превращение типа фазового перехода $2\frac{1}{2}$ рода совмещается со сверхпроводящим фазовым переходом. Поскольку переход металла в сверхпроводящее состояние есть настоящий фазовый переход, то «вмешательство» в его термодинамику ситуации, описанной выше, представляет безусловный интерес.

Мы обращали внимание на то, что электроны в металле могут быть разделены на группы с сильно отличающимися поверхностями Ферми и динамическими свойствами. В процессе электронно-топологического фазового перехода одна или несколько малых групп электронов могут появляться или исчезать. При этом резко изменяются многие физические характеристики металла: величины и анизотропия электропроводности, магнитоупругих эффектов и эффекта Холла. Теоретическое рассмотрение возникающих в таких условиях интересных физических явлений было предложено в работах В. Барьяхтара и В. Макарова [55]. Работы [55] дали прекрасное объяснение обнаруженным эксперимен-

тально, примерно в то же время, особенностей влияния давления на сверхпроводящий переход в таллии [56]. Был опубликован подробный обзор экспериментальных и теоретических исследований проявления топологических особенностей электронного спектра в сверхпроводящих характеристиках металла, выполненных харьковскими физиками [57].

Электронно-топологические особенности при сверхпроводящем фазовом переходе под высоким давлением могут приводить даже к заметному изменению колебательного спектра кристалла благодаря сильному электрон-фононному взаимодействию. Подобное наблюдается в высокотемпературном сверхпроводнике MgB_2 . Специфика и своеобразие электронной и фононной структуры этого кристалла заключаются в том, что, во-первых, имеется две различные группы электронов проводимости: большая группа электронов со свойствами, типичными для $3D$ электронного газа, и малая группа с практически $2D$ динамикой, закон дисперсии которой аналогичен (33) и поверхность Ферми близка к цилиндру — ситуация, подобная той, что проанализирована при обсуждении рис. 25; во-вторых, за электрон-фононное взаимодействие, обеспечивающее куперовское спаривание электронов, ответственна в основном только одна фононная мода, соответствующая движению атомов бора в базисной плоскости [58]. Сильное взаимодействие этой колебательной моды с малой электронной группой делает ее весьма чувствительной к состоянию малой электронной группы: когда малая электронная группа исчезает при изменении давления, на экспериментальных кривых соответствующих зависимостей, связанных с состоянием колебательной системы, возникает излом (достаточно полную библиографию по этому вопросу можно найти в статье [59] и обзоре [60]).

Автор благодарен Оксане Чаркиной за помощь в подготовке рукописи, Александру Котляру — за помощь в подготовке иллюстраций, глубоко признателен В.Г. Песчанскому, В.М. Гвоздикову и Е.С. Сыркину за полезные обсуждения, а И.К. Янсону — за ценные замечания.

1. Mikio Nakahara, *Geometry, Topology, and Physics*, Inst. Physics Publishing, Bristol (1990).
2. М. Монастырский, *Риман, топология и физика*, ПАИМС, Москва (1990).
3. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
4. Г. Бете, А. Зоммерфельд, *Электронная теория металлов*, ОНТИ (1938).

5. W.A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals*, New York (1966); У. Харрисон, *Псевдопотенциалы в теории металлов*, Мир, Москва (1968).
6. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, Москва (1986) [D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge University Press, Cambridge (1984)].
7. L. Onsager, *Philos. Mag.* **43**, 1006 (1952).
8. М.Я. Азбель, *ЖЭТФ* **39**, 1276 (1960); там же **46**, 929 (1964).
9. И.М. Лифшиц, А.М. Косевич, *ДАН СССР* **96**, 963 (1954); И.М. Лифшиц, А.М. Косевич, *ЖЭТФ* **29**, 730 (1955); I.M. Lifshitz and A.M. Kosevich, *Sov. Phys. JETP* **2**, 636 (1956).
10. Joachim Wosnitza, *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals*, Springer, Berlin (1996).
11. И.М. Лифшиц, А.В. Погорелов, *ДАН СССР* **96**, 1143 (1954).
12. А.М. Косевич, В.В. Андреев, *ЖЭТФ* **38**, 882 (1960).
13. M. Coken and L. Falikov, *Phys. Rev. Lett.* **5**, 544 (1960),
14. R.W. Stark and L.M. Falikov, *Progress in Low Temperature Physics*, v. 5, North-Holland, Amsterdam (1967), p. 235; M.I. Kaganov and A.A. Slutskin, *Phys. Rep.* **98**, 189 (1983); Ю.Н. Прошин, Н.Х. Усеинов, *УФН* **165**, 41 (1995).
15. Г.Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **30**, 1096 (1956); *ЖЭТФ* **32**, 296 (1957).
16. E.I. Blount, *Phys. Rev.* **126**, 1636 (1962).
17. В.М. Гвоздилов, *ФНТ* **7**, 705 (1986).
18. F. Bloch, *Z. Phys.* **52**, 555 (1928); C. Zener, *Proc. Roy. Soc. London A* **145**, 523 (1934).
19. C. Wannier, *Phys. Rev.* **117**, 432 (1960); T. Mendes, F. Agullo-Rueda, and J. Hong, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2426 (1988); P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gailard, C. Albert, and A. Regreny, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 1639 (1988);
20. А.М. Косевич, *ФНТ* **27**, 699 (2001).
21. J. Feldman, K. Leo, J. Shah, D.A. Miller, J.E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Shulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, *Phys. Rev.* **B46**, 7952 (1992); K. Leo, P. Haring Bolivar, F. Brueggemann, R. Schwedler, and K. Koehler, *Solid State Commun.* **84**, 943 (1992).
22. C. Waschke, H. Roskos, R. Schwedler, K. Leo, H. Kurz, and K. Koehler, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3319 (1993).
23. L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14**, 61 (1970).
24. F.G. Bass and A.A. Bulgakov, *Kinetic and Electrodynamical Phenomena in Classical and Quantum Semiconductor Superlattices*, Nova Science Publishers, Inc. New York (1998).
25. С.П. Новиков, А.Ю. Мальцев, *УФН* **168**, 249 (1998).
26. M.I. Kaganov and V.G. Peschansky, *Phys. Rep.* **372**, 445 (2002).
27. И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **35**, 1251 (1958).
28. И.М. Лифшиц, В.Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **38**, 188 (1960).
29. А.А. Абрикосов, *Введение в теорию нормальных металлов*, Наука, Москва (1972).
30. А.М. Косевич, И.Д. Вагнер, *ФНТ* **25**, 868 (1999).
31. М.Я. Азбель, Э.А. Канер, *ЖЭТФ* **32**, 896 (1957); *Phys. Chem. Solids* **6**, 113 (1958).
32. Э.А. Канер, *Избранные труды*, Наукова думка, Киев (1989).
33. M.V. Berry, *Proc. R. Soc. London A* **392**, 45 (1984).
34. Laura M. Roth, *Phys. Rev.* **145**, 434 (1966).
35. Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
36. И.О. Кулик, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 407 (1970).
37. J. Zak, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2747 (1989).
38. W.V. Houston, *Phys. Rev.* **57**, 184 (1940).
39. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, ч. 2, Наука, Москва (1978) [E.M. Lifshitz and L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics*, p. 2, Pergamon, Oxford (1986)].
40. G.P. Mikitik and V. Shalal, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2147 (1999).
41. C. Herring, *Phys. Rev.* **52**, 365 (1937).
42. E.I. Blount, *Solid State Physics*, v. 13, Academic Press, New York (1962), p. 305.
43. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **8**, 293 (1948); I.M. Lifshitz, *Nuovo Cimento Suppl.* **3**, 716 (1956).
44. И.М. Лифшиц, В.И. Пересада, *Учен. зап. Харьк. ун-та, Труды физ. отд. физ.-мат. фак.* **6**, 37 (1955).
45. А.М. Косевич, *Теория кристаллической решетки (физическая механика кристаллов)*, Харьков, Вища школа (1988); Arnold M. Kosevich, *The Crystal Lattice. Phonons, Solitons, Dislocations*, WILEY-VCH, Berlin (1999).
46. A.G. Every, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2478 (1997); *Phys. Rev.* **B58**, 1601 (1998).
47. James P. Wolfe, *Imaging Phonons. Acoustic Wave Propagation in Solids*, Univ. Press., Cambridge (1998).
48. А.М. Косевич, *ФНТ* **11**, 1106 (1985).
49. J. Heil, M. Primke, K.U. Wurz, and P. Wyder, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 146 (1995); M. Primke, J. Heil, P. Wyder, *Physica* **B218**, 26 (1996).
50. А.М. Косевич, Ю.А. Косевич, Е.С. Сыркин *ЖЭТФ* **88**, 1089 (1985); Yu.A. Kosevich, E.S. Syrkin, and A.M. Kosevich, *Prog. Surf. Sci.* **55**, 59 (1997).
51. А.М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов*, Наукова думка, Киев (1981).
52. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **38**, 1569 (1960).
53. А.М. Косевич, *ЖЭТФ* **35**, 249 (1958); *Материалы V Всесоюзн. сов. по физ. низк. температур, АН ГрССР*, Тбилиси (1960), с. 153.
54. И.М. Дмитренко, Б.И. Веркин, Б.Г. Лазарев, *ЖЭТФ* **33**, 287 (1957); *ЖЭТФ* **35**, 2 (1958).
55. В.Г. Барьяхтар, В.И. Макаров, *ЖЭТФ* **48**, 1717 (1965); *ЖЭТФ* **49**, 1934 (1965).
56. Б.Г. Лазарев, Л.С. Лазарева, В.И. Макаров, Т.А. Игнатьева, *ЖЭТФ* **48**, 1065 (1965); Н.Б. Брандт,

- Н.И. Гинзбург, А.Н. Игнатъева, Б.Г. Лазарев, Л.С. Лазарева, *ЖЭТФ* **49**, 85 (1965); Б.Г. Лазарев, Л.С. Лазарева, А.Н. Игнатъева, В.И. Макаров, *Доклады АН СССР* **163**, 74 (1965).
57. В.Г. Барьяхтар, Б.Г. Лазарев, В.И. Макаров, *ФММ* **24**, 829 (1967).
58. J. Kortus, I.I. Mazin, K.D. Belashchenko, V.P. Antropov, and L.L. Boyer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4656 (2001); J.M. An and W.E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4366 (2001); Y. Kong, O.V. Dolgov, O. Jepsen, and O.K. Andersen, *Phys. Rev.* **B64**, R0205011 (2001); T. Yildirim, O. Gulseren, J.W. Lynn, et al., *Phys. Rev. Lett.* **87**, 037001 (2001).
59. A.F. Goncharov and V.V. Struzhkin, *Physica* **C385**, 117 (2003).
60. J.K. Yanson and Yu.G. Naidyuk, *Fiz. Nizk. Temp.* **30**, No. 4 (2004).

Topology and physics of solids
(Review Article)

A.M. Kosevich

The topological aspect of the dynamics of electrons in crystals (band electrons) and vibrations of a crystal lattice (phonons) is discussed. The main peculiarities of such electrons are connected with the form of their isoenergetic surfaces which differ from those for free electrons. It is shown that in response to external electric and magnetic fields the behavior of the band electrons in metals at low temperatures depends strongly on the Fermi surface topology (the isoenergetic surfaces for the Fermi energy). Various examples of such a dependence are described. The peculiarities of the phonon dynamics create singularities of the vibration density of states (van Hove singularities), which are connected with the topology of isoenergetic surfaces. The nature of what is known as «the second and a half»-kind phase transition is explained.