Физика низких температур, 2000, т. 26, № 8, с. 810–814

О квантовых магниторазмерных осцилляционных эффектах в органических проводниках

М. Я. Азбель

School of Physics and Astronomy, Tel Aviv University, Tel Aviv, 69978, Izrael

О. В. Кириченко, В. Г. Песчанский

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины
Украина, 61164, г. Харьков, пр. Ленина, 47
E-mail: vpeschansky@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 5 апреля 2000 г.

Теоретически исследованы квантовые магниторазмерные осцилляции (КМРО) термодинамических величин в слоистых органических проводниках с квазидвумерным электронным энергетическим спектром произвольного вида. Показано, что модуляция КМРО содержит детальную информацию о законе дисперсии носителей заряда.

Теоретично досліджено квантові магніторозмірні осциляції (КМРО) термодинамічних характеристик шаруватих органічних провідників з довільним квазідвовимірним електронним енергетичним спектром. Показано, що модуляція КМРО містить детальну інформацію про закон дисперсії носіїв заряду.

PACS: 71.20.Rv, **76.20.+q**

Квантовые осцилляционные эффекты Шубникова–де Гааза и де Гааза–ван Альфена [1–3] наиболее ярко проявляются в проводниках органического происхождения. Это связано с низкоразмерным характером энергетического спектра носителей заряда в органических проводниках, которые, как правило, обладают слоистой либо нитевидной структурой с резкой анизотропией электропроводности. Электронный энергетический спектр слоистых проводников является квазидвумерным, а закон дисперсии носителей заряда $\varepsilon(\mathbf{p})$ в нитеобразных проводниках с высокой электропроводностью лишь вдоль нити, по-видимому, имеет квазиодномерный характер. Высокая электропроводность органических проводников хотя бы в одном направлении (например, вдоль оси y) свидетельствует о большом числе носителей заряда в них, и эти проводники по крайней мере в этом направлении обладают металлическим типом проводимости.

Поверхность Ферми $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_F$ квазиодномерных проводников можно представить в виде слабогофрированных плоскостей в импульсном пространстве. В слоистых проводниках, помещенных в магнитное поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, приложенное вдоль слоев, большая часть носителей заряда движется по открытым траекториям в импульсном пространстве и, естественно, не принимает участия в формировании квантовых осцилляционных эффектов в массивных образцах, толщина которых L много больше длины свободного пробега носителей заряда l [4]. Однако в тонких проводниках ($L \le l$) с достаточно гладкой поверхностью, почти зеркально отражающей электроны проводимости, площади открытых сечений плоскостью $p_z = \text{const}$ изоэнергетической поверхности $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_F$, усеченных зеркальными отражениями носителей заряда границей образца, $S(\varepsilon, p_x, p_y)$ могут принимать лишь дискретные значения, которые отличаются на величину, кратную $2\pi\hbar eH/c$, где e — заряд электрона; $\hbar$ — постоянная Планка; c — скорость света в вакууме. В результате электроны проводимости на открытых сечениях поверхности Ферми создают своеобразный осцилляционный эффект [5–7], при котором магниторазмерные квантовые осцилляции намагниченности и магнитосопротивления сопровождаются модуляцией амплитуды.

В слоистых органических проводниках в формирование квантовых магниторазмерных осцилляций вовлечено значительно большее число носителей заряда, чем в обычных квазиизотропных металлах из-за слабой зависимости в них $S(\varepsilon, p_x, p_y)$ от проекции импульса p_x (ось x направлена вдоль нормали к слоям). В квазиодномерных проводниках следует ожидать еще более яркого проявления квантового магниторазмерного эффекта, поскольку в них усеченные зеркальными отражениями площади сечений поверхности Ферми слабо зависят также и от p_z [8]. В результате усреднение по этим переменным не приводит к существенному уменьшению амплитуды осцилляций по сравнению со случаем квазиизотропных металлов.

Рассмотрим квантовые магниторазмерные осцилляционные эффекты в органических проводниках с произвольным видом электронного энергетического спектра

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon_n(p_y, p_z) \cos\left[\frac{anp_x}{\hbar} + \alpha_n(p_y, p_z)\right]. \quad (1)$$

Коэффициенты при косинусах в (1), как правило, быстро убывают с ростом номера n, и максимальное значение функции $\varepsilon_1(p_y, p_z)$ на поверхности Ферми равно $\eta\varepsilon_F \ll \varepsilon_F$, где η — параметр квазидвумерности электронного энергетического спектра слоистого проводника; a — расстояние между слоями; $\alpha_n(p_y, p_z) = -\alpha_n(-p_y, -p_z)$. В квазиодномерных проводниках функции $\varepsilon_n(p_y, p_z) = \varepsilon_n(-p_y, -p_z)$, включая и $\varepsilon_0(p_y, p_z)$, слабо зависят от p_z.

В магнитном поле, параллельном поверхности тонкой пластины с достаточно гладкими гранями $y = 0, L$, квантование площадей принимает следующий вид:

$$S(\varepsilon, p_x, p_z) = \int_{p_x}^{p_x + eHL/c} 2p_y(\varepsilon, p_x, p_z)dp_x =$$

$$= 2\pi\hbar \frac{eH}{c}(n + \gamma), \quad (2)$$

где $-1 < \gamma \le 0$, а $n = 1, 2, 3, \ldots$, т.е. n — целое положительное число. Исключительно ради краткости анализа осцилляционных эффектов полагаем, что открытые сечения поверхности Ферми являются симметричными, $p_y(p_x, p_z) = -p_y(-p_x, p_z)$.

В области не слишком сильных магнитных полей, когда a много меньше не только L, но и характерного квантового радиуса $\rho = (c\hbar/eH)^{1/2}$, для нахождения квантованного энергетического спектра электронов проводимости с помощью соотношения (2) можно воспользоваться их квазиклассическими траекториями в магнитном поле. Разрешив относительно p_y уравнение $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon$, где $\varepsilon(\mathbf{p})$ задано соотношением (1), получим для среднего значения проекции импульса p_y выражение

$$\overline{p}_y(\varepsilon, p_x, p_z) = \frac{c}{eHL}\int_{p_x}^{p_x + eHL/c} p_y(\varepsilon, p_x, p_z)dp_x = \frac{\pi\hbar}{L}n. \quad (3)$$

Если квантовый радиус ρ сравним с расстоянием между слоями a, что справедливо для наноструктур и сверхрешеток, то энергетический спектр электронов проводимости можно определить с помощью решения уравнения Шредингера

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}/c)\psi = \varepsilon\psi. \quad (4)$$

$\mathbf{A} = (Hy, 0, 0)$ — векторный потенциал. В калибровке Ландау векторного потенциала гамильтониан $\hat{H}(P_x - (eH/c)y, \hat{p}_y, p_z)$ не зависит от x, z и компоненты обобщенного импульса P_x; p_z являются хорошими квантовыми числами. При $\eta \ll 1$ гамильтониан слабо зависит от кинематического импульса $p_x = (P_x - eHy/c)$ и, следовательно, от y. В пределе $\eta = 0$ хорошим квантовым числом, характерующим состояние электрона проводимости, будет также и p_y, а действие оператора $\hat{p}_y$ на волновую функцию ψ при отличных от нуля, но малых η запишем как

$$\hat{p}_y\psi = p_y^0\psi + \delta\hat{p}_y\psi, \quad (5)$$

где $\delta\hat{p}_y$ стремится к нулю вместе с η.

При малых η решение уравнения (4) можно представить как

$$\psi(x, y, z) = u(y)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(xp_x + yp_y^0 + zp_z)\right]. \quad (6)$$

В линейном приближении по малому параметру η уравнение для функции $u(y)$ имеет вид

$$\left[\varepsilon_0(p_y^0, p_z) + \varepsilon_1(p_y^0, p_z)\cos\left(\frac{ap_x}{h} - \frac{eHa}{c\hbar}y + \alpha_1(p_y^0, p_z)\right)\right]u(y) - i\hbar v_y^0\frac{\partial u(y)}{\partial y} = \varepsilon u(y), \quad (7)$$

где $v_y^0 = \partial\varepsilon_0(p_y^0, p_z)/\partial p_y^0$.

Решение уравнения (7) должно удовлетворять граничному условию $u(0) = u(L) = 0$, которое и определяет квантованные уровни энергии носителей заряда. Этому граничному условию может удовлетворять стоячая волна с узлами при $y = 0$ и L. Сконструировав стоячую волну с помощью решений уравнения (7), легко получить квантованный энергетический спектр носителей заряда. В основном приближении по параметру η имеем

$$\varepsilon_n^0(p_z) = \varepsilon_0\left(\frac{\pi\hbar n}{L}, p_z\right), \tag{8}$$

а зависимость уровней энергии от величины магнитного поля появляется в малых поправках к этой величине по параметру η.

Для определения квантовых магниторазмерных осцилляций намагниченности и прочих термодинамических величин достаточно вычислить термодинамический потенциал Ω образца, заключенного в объеме V:

$$\Omega = -\Theta\sum_\sigma\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2V}{L(2\pi\hbar)^2}\times$$

$$\times\int dp_x\int dp_z\ln\left(1+\exp\frac{-\varepsilon+\zeta_\sigma}{\Theta}\right), \tag{9}$$

где Θ — температура, умноженная на постоянную Больцмана; $\zeta_\sigma = \zeta \pm \mu H$, ζ — химический потенциал; μ — магнетон Бора. С помощью формулы Пуассона запишем осциллирующую часть потенциала:

$$\tilde{\Omega} = \mathrm{Re}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_\sigma I_k, \tag{10}$$

где

$$I_k = -\Theta\frac{2V}{L(2\pi\hbar)^2}\times$$

$$\times\int_{-\gamma}^{\infty}dn\int dp_x\int dp_z\exp(2\pi ikn)\ln\left(1+\exp\frac{-\varepsilon+\zeta_\sigma}{\Theta}\right). \tag{11}$$

Заменив в интеграле переменную n более удобной переменной интегрирования ε, получим

$$I_k = -\Theta\frac{2V}{L(2\pi\hbar)^2}\int_{\varepsilon_0}^{\infty}d\varepsilon\int dp_x\times$$

$$\times\int dp_z\ln\left(1+\exp\frac{\zeta_\sigma-\varepsilon}{\Theta}\right)\frac{\partial n}{\partial\varepsilon}\exp(2\pi ikn). \tag{12}$$

Следует отметить, что при $\Theta << \zeta$ основной вклад в I_k вносит окрестность точки $\varepsilon = \zeta_\sigma$. Пределы интегрирования по p_z, вообще говоря, определяются из условия $S > 0$. Однако осциллирующая часть намагниченности проводника формируется носителями заряда с экстремальными значениями S. При любом законе дисперсии электронов проводимости S имеет экстремум на центральном сечении поверхности Ферми плоскостью $p_z = 0$ и, возможно, еще несколько экстремумов в случае достаточно сложного спектра носителей заряда.

Рассмотрим наиболее простую модель закона дисперсии квазидвумерного проводника, когда S имеет один экстремум при $p_z = 0$, а именно:

$$\varepsilon = \frac{p_y^2 + p_z^2}{2m} + \eta A\cos\frac{ap_x}{\hbar}, \tag{13}$$

где постоянная A совпадает по величине с ε_F.

Такой закон дисперсии носителей заряда позволяет получить не только квазиклассическое, но и точное решение уравнения (4). При вычислении осцилляций намагниченности достаточно учесть лишь небольшую окрестность точки $p_z = 0$, где

$$p_z^2 \le p_0^2 << 2m\varepsilon.$$

Тогда, определяя n из условия квантования (2), его можно представить в виде двух слагаемых — основного, которое не зависит от H, и малой добавки, пропорциональной η и зависящей от магнитного поля:

$$n = -\gamma + \frac{L\sqrt{2m}}{2\pi\hbar}\sqrt{\varepsilon - p_z^2/2m}\times$$

$$\times\left[1 - \eta\frac{Ar}{2L(\varepsilon - p_z^2/2m)}\sin\frac{L}{2r}\cos\left(\frac{ap_x}{\hbar}+\frac{L}{2r}\right)\right], \tag{14}$$

где $r = c\hbar/eHa$. Мы будем полагать выполненным условие

$$\frac{R}{L}\,\eta << 1\ . \tag{15}$$

Изменив порядок интегрирования в формуле (12), сначала проинтегрируем по частям по ε и, оставив только быстроосциллирующие слагаемые, получим

$$I_k = -\frac{V}{L(2\pi\hbar)^2\pi ik}\int\limits_{-\pi\hbar/a}^{\pi\hbar/a} dp_x \int\limits_{-p_0}^{p_0} dp_z\,\frac{1}{2\pi ik}\times$$

$$\times\int\limits_{\varepsilon_0}^{\infty} d\varepsilon f\left(\frac{\varepsilon-\zeta_\sigma}{\Theta}\right)\exp\,(2\pi ikn)\ , \tag{16}$$

где $f(x) = (1 + \exp x)^{-1}$ — функция распределения Ферми. Подставим выражение (14) для n в (16):

$$I_k = \frac{V}{L2\pi^2\hbar a}\exp\left(-2\pi ik\gamma - \frac{i\pi}{2}\right)\int\limits_0^{\infty} d\varepsilon f\left(\frac{\varepsilon-\zeta_\sigma}{\Theta}\right)\times$$

$$\times\int\limits_{-p_0}^{p_0} dp_z\,\exp\left(\frac{ikL\,\sqrt{2m\varepsilon - p_z^2}}{\hbar}\right)\times$$

$$\times J_0\left(\frac{\eta krA2m}{\hbar\,(2m\varepsilon - p_z^2)^{1/2}}\sin\frac{L}{2r}\right), \tag{17}$$

где J_0 — функция Бесселя.

При интегрировании по p_z следует использовать метод стационарной фазы. Учитывая неравенство (15), легко заметить, что наиболее быстро меняющаяся функция под интегралом — это функция $\exp\,(ikL\,\sqrt{2m\varepsilon - p_z^2}/\hbar\,)$, которая имеет точку стационарности $p_z = 0$.

В результате несложных вычислений приходим к выражению

$$I_k = -\frac{2^{1/4}V\hbar^{1/2}\zeta^{3/4}}{\pi^{3/2}ak^{5/2}L^{5/2}m^{1/4}}\,\Psi(k\Lambda)\times$$

$$\times\exp\left(-2\pi ik\gamma - i\,\frac{\pi}{4} + i\,\frac{kL\,\sqrt{2m\zeta_\sigma}}{\hbar}\right)\times$$

$$\times J_0\left(\frac{\eta krA\,\sqrt{2m}}{\hbar\,\sqrt{\zeta_\sigma}}\sin\frac{L}{2r}\right), \tag{18}$$

где $\Psi(z) = z/\sinh z$, $\Lambda = (\pi\Theta L/2\hbar\zeta)\,\sqrt{2m\zeta}$. В плавно меняющихся функциях ζ_σ можно заменить величиной ζ, поскольку $\mu H << \zeta$.

С помощью формул (10) и (18) осциллирующую часть термодинамического потенциала можно записать в виде

$$\tilde{\Omega} = \Omega_0\sum_k \frac{\Psi(k\Lambda)}{k^{5/2}}\sum_\sigma \cos\left(-2\pi k\gamma - \frac{\pi}{4} + \frac{kL}{\hbar}\sqrt{2m\zeta_\sigma}\right)\times$$

$$\times J_0\left(\frac{\eta krA\,\sqrt{2m}}{\hbar\,\sqrt{\zeta_\sigma}}\sin\frac{L}{2r}\right), \tag{19}$$

где $\Omega_0 = 2^{5/4}V\hbar^{1/2}\zeta^{3/4}/(\pi^{3/2}aL^{5/2})$.

Дальнейшее вычисление квантовых осцилляций термодинамических величин выполняется с помощью элементарного дифференцирования выражения (19). Определим осциллирующую часть магнитного момента $\tilde{M}$ в направлении магнитного поля

$$\tilde{M} = -\frac{\partial\tilde{\Omega}}{\partial H}\ . \tag{20}$$

Оставляя лишь главные члены по параметру $\mu H/\zeta$, получаем

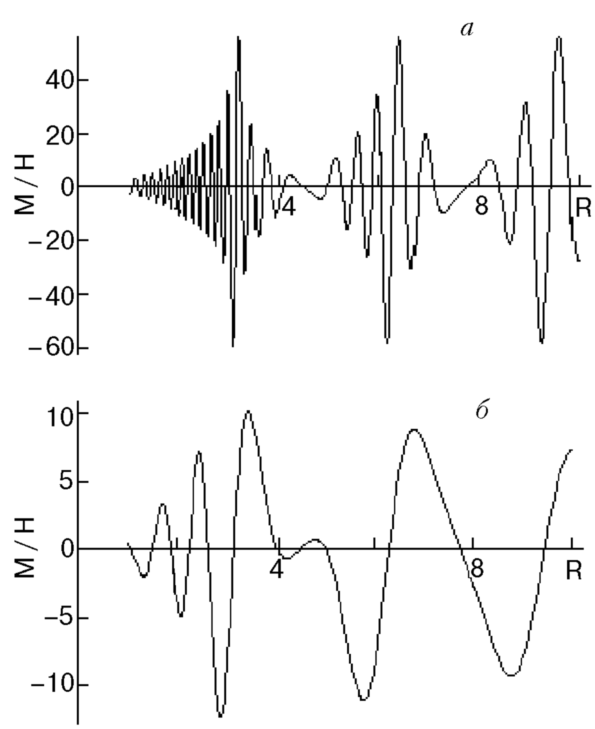

Рис. 1. Зависимость M/H от $R = LeHa/2c\hbar$ в относительных единицах, $\lambda = 100$ (*а*) и 30 (*б*).

$$\tilde{M} = \frac{2\Omega_0}{H} \sum_k \frac{\Psi(k\Lambda)}{k^{5/2}} \cos\left(-2\pi k\gamma - \frac{\pi}{4} + \frac{kL}{\hbar}\sqrt{2m\zeta}\right) \times$$

$$\times \frac{\lambda}{R} (-\sin R + R\cos R)\, J_1\left(k\frac{\lambda}{R}\sin R\right), \qquad (21)$$

где $R = L/2r$, $\lambda = \eta ALm/(\hbar\sqrt{2m\zeta}\,)$.

Аргумент функции Бесселя J_0 в выражении (21) обращается в нуль, когда толщина образца L кратна периоду открытой электронной траектории $2\pi r$. С изменением магнитного поля кратность L величине $2\pi r$ периодически нарушается и восстанавливается. Это приводит к модуляции магниторазмерных осцилляций (рис. 1).

Нетрудно получить осцилляционную зависимость намагниченности в случае квазидвумерного электронного энергетического спектра произвольного вида. Удерживая лишь два первых слагаемых в соотношении (1), получаем выражение для $\tilde{M}$, аналогичное (21), в котором $\eta Am/\sqrt{2m\zeta}$ следует заменить величиной ε_1/v_0 , где $v_0 = \partial\varepsilon(p_y\, , 0)/\partial p_y$.

1. М. В. Карцовник, В. Н. Лаухин, В. Н. Нижанковский, А. А. Игнатьев, *Письма в ЖЭТФ* **47**, 302 (1988).
2. М. В. Карцовник, П. А. Кононович, В. Н. Лаухин, И. Ф. Щеголев, *Письма в ЖЭТФ* **48**, 4978 (1988).
3. I. D. Parker, D. D. Pigram, R. H. Friend, M. Kurmo, and P. Day, *Synth. Met.* **27**, A387 (1988).
4. А. М. Косевич, И. М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **29**, 743 (1955).
5. С. С. Недорезов, В. Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **80**, 368 (1981).
6. S. S. Nedorezov and V. G. Peschansky, *Physica* **108B**, 903 (1981).
7. В. М. Гохфельд, О. В. Кириченко, В. Г. Песчанский, *ЖЭТФ* **79**, 538 (1980).
8. M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 422 (1999).

On quantum magnetosize oscillatory effects in organic conductors

M. Ya. Azbel, O. V. Kirichenko, and V. G. Peschansky

Quantum magnetosize oscillations (QMSO) of thermodynamical characteristics in layered conductors, possessing a quasi-two-dimensional electron energy spectrum of an arbitrary form, are studied theoretically. The QMSO modulation is shown to contain detailed information on the dispersion relations of charge carriers.