

Московский физико-технический институт  
Кафедра общей физики

Лекция 7

МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ СТРУКТУРЫ  
И КОЛЕБАНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ.  
МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ ФЕРМИ-ПОВЕРХНОСТЕЙ.

заметки к лекциям по общей физике

В.Н.Глазков

Москва

2018

В данном пособии представлены материалы к лекции по теме «Методы изучения спектров колебаний и свойств ферми-поверхности в твёрдых телах» из курса «Основы современной физики: Квантовая макрофизика», преподаваемого на кафедре общей физики МФТИ. Пособие не претендует на полноту изложения материала и в основном является авторскими заметками к лекциям, оно содержит основные сведения по этой теме курса. Материал по методам изучения структуры и колебаний решётки подробно обсуждается в методическом пособии [1].

Основные методы, рассматриваемые на этой лекции:

1. Неупругое рассеяние света
2. Упругое и неупругое рассеяние нейтронов и рентгеновских лучей
3. Фотоэффект в металлах и метод ARPES.
4. Туннелирование электронов между металлами.
5. Циклотронное движение электрона в металле и его связь с геометрией поверхности Ферми

## Оглавление

Введение.....	4
Изучение структуры и колебаний кристаллов.....	4
Определение кристаллической структуры.....	4
Неупругие процессы с участием видимого света.....	5
Неупругое рассеяние нейтронов.....	7
Методы изучения поверхности Ферми.....	12
Внешний фотоэффект, зонная структура и энергия Ферми.....	12
Метод ARPES.....	14
Туннельный ток и плотность состояний на поверхности Ферми.....	18
Циклотронные орбиты и их связь с геометрией поверхности Ферми.....	20
Уравнение динамики для электрона в кристалле в магнитном поле.....	20
Траектория электрона в металле в магнитном поле.....	21
Уровни Ландау.....	26
Осцилляции проводимости и намагниченности.....	27
Эффект Шубникова-де Гааза.....	28
Эффект де Гааза- ван Альфена.....	31

## Список литературы

- 1: В.Н.Глазков, Методы изучения структуры и колебаний кристаллов, 2016
- 2: G. V. Benedek and K. Fritsch, Brillouin scattering in cubic crystals, Physical Review, 149, 647(1966)
- 3: Вэб-сайт Института Лауэ-Ланжевена в Гренобле, <http://www.ill.eu/>
- 4: Сайт Института Поля Шерпера, <http://www.psi.ch/>
- 5: Y. Fujii, N. A. Lurie, R. Pynn, and G. Shirane, Inelastic neutron scattering from solid  $36\text{Ar}$ , Physical Review B, 10, 3647(1974)
- 6: Stefan Hüfner, Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications, 1995
- 7: Andrea Damascelli, Probing the Electronic Structure of Complex Systems by ARPES, Physica Scripta, 109, 61(2004)
- 8: F. Lichtenberg, The story of  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ , Progress in Solid State Chemistry, 30, 103(2002)
- 9: Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Теоретическая физика, том 2: Теория поля, 1988
- 10: Ч.Киттель, Введение в физику твёрдого тела.,
- 11: А.А.Абрикосов, Основы теории металлов, 2010
- 12: T.Terashima, C.Terakura, S.Uji, H.Aoki, Y.Echizen and T.Takabatake, Resistivity, Hall effect and Shubnikov-de Haas oscillations in  $\text{CeNiSn}$ , arXiv:cond-mat,0207379(2002)
- 13: Shubnikov-de Haas Effect, <http://www.lanl.gov/orgs/mpa/nhmfl/users/pages/Shubnikov.htm>
- 14: De Haas-van Alphen oscillations in the underdoped cuprate  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ , <http://www.toulouse.lncmi.cnrs.fr/spip.php?rubrique69&lang=en>
- 15: Cyril Jaudet, David Vignolles, Alain Audouard, Julien Levallois, D. LeBoeuf, Nicolas Doiron-Leyraud, B. Vignolle, M. Nardone, A. Zitouni, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, Louis Taillefer, and Cyril Proust, de Haas-van Alphen Oscillations in the Underdoped High-Temperature Superconductor  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.5}$ , Phys. Rev. Lett., 100, 187005(2008)
- 16: Ilya Sheikin, Pierre Rodiere, Rikio Settai, Yoshichika Onuki, High-Field de Haas-van Alphen Effect in non-centrosymmetric  $\text{CeCoGe}_3$  and  $\text{LaCoGe}_3$ , Journal of the Physical Society of Japan, 80, SA020(2011)
- 17: C.Martin, C.C.Agosta, S.W.Tozer, H.A.Radovan, Tatsue Kinoshita, and M.Tokumoto, Critical field and Shubnikov-de Haas oscillations of  $\kappa$ -(BEDT-TTF) $_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$  under pressure, arXiv:cond-mat,0303315(2003)

## Введение

В ходе курса было введено несколько новых концепций — в первую очередь это концепция описания коллективных степеней свободы кристалла (упругих волн в кристалле) на языке квазичастиц-фононов. Кроме того, при рассмотрении электронов в металле мы показали, что электроны в обычном металле формируют вырожденный ферми-газ, занимая все состояния в  $k$ -пространстве с энергией меньше энергии Ферми. При этом поверхность Ферми, ограничивающая область занятых состояний в  $k$ -пространстве может оказываться довольно причудливой.

Возникает естественный вопрос — не являются ли эти новые концепции какой-то «вещью в себе», существуют ли экспериментальные методы, позволяющие убедиться в реальном существовании квазичастиц и поверхности Ферми?

Целью данной лекции будет рассмотреть вкратце основные методы, применяемые в современной физике твёрдого тела к изучению спектров возбуждений и электронного газа. Часть лекции по методам изучения структуры и колебаний в кристаллах содержит материал, подробно изложенный в методическом пособии [1], поэтому в этом тексте изложение этой темы конспективно.

## Изучение структуры и колебаний кристаллов

### Определение кристаллической структуры

Напомним, что существование регулярной кристаллической структуры может быть подтверждено в дифракционном эксперименте с использованием рентгеновской дифракции. Условием дифракции является  $\Delta \vec{k} = \vec{G}$ , где  $\vec{G}$  — один из векторов обратной решётки.

Примером реально используемого в лабораториях современного рентгеновского дифрактометра является система Bruker Smart Apex II (рисунок 1)

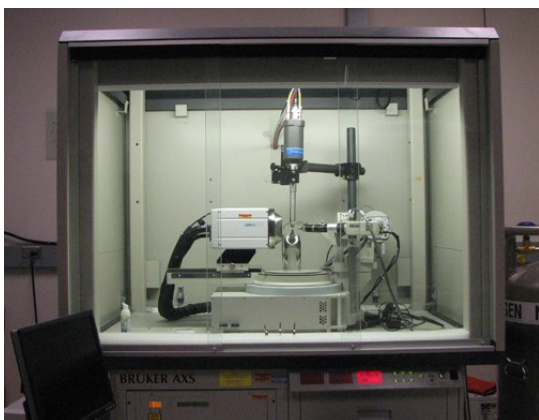


Рисунок 1 Слева: дифрактометр Bruker Smart Apex II (с сайта <http://www.cif.iastate.edu/x-ray/apexii>). Справа: вид на образец в дифрактометре (фото автора). Справа налево по рис.: коллиматорная трубка, видеокамера, образец на гониометрической головке, полупроводниковый детектор.

Этот дифрактометр работает с монокристаллами с использованием монохроматического рентгеновского излучения ( $K\alpha$  линия молибдена, длина волны  $0.71073 \text{ \AA}$ ). Образец может поворачиваться вокруг двух осей (ось гониометрической головки и поворот платформы с гониометрической головкой в горизонтальной плоскости), детектор также может перемещаться в горизонтальной плоскости. Во время эксперимента фиксируются картины дифракции при известных углах поворота образца (рисунок 2).

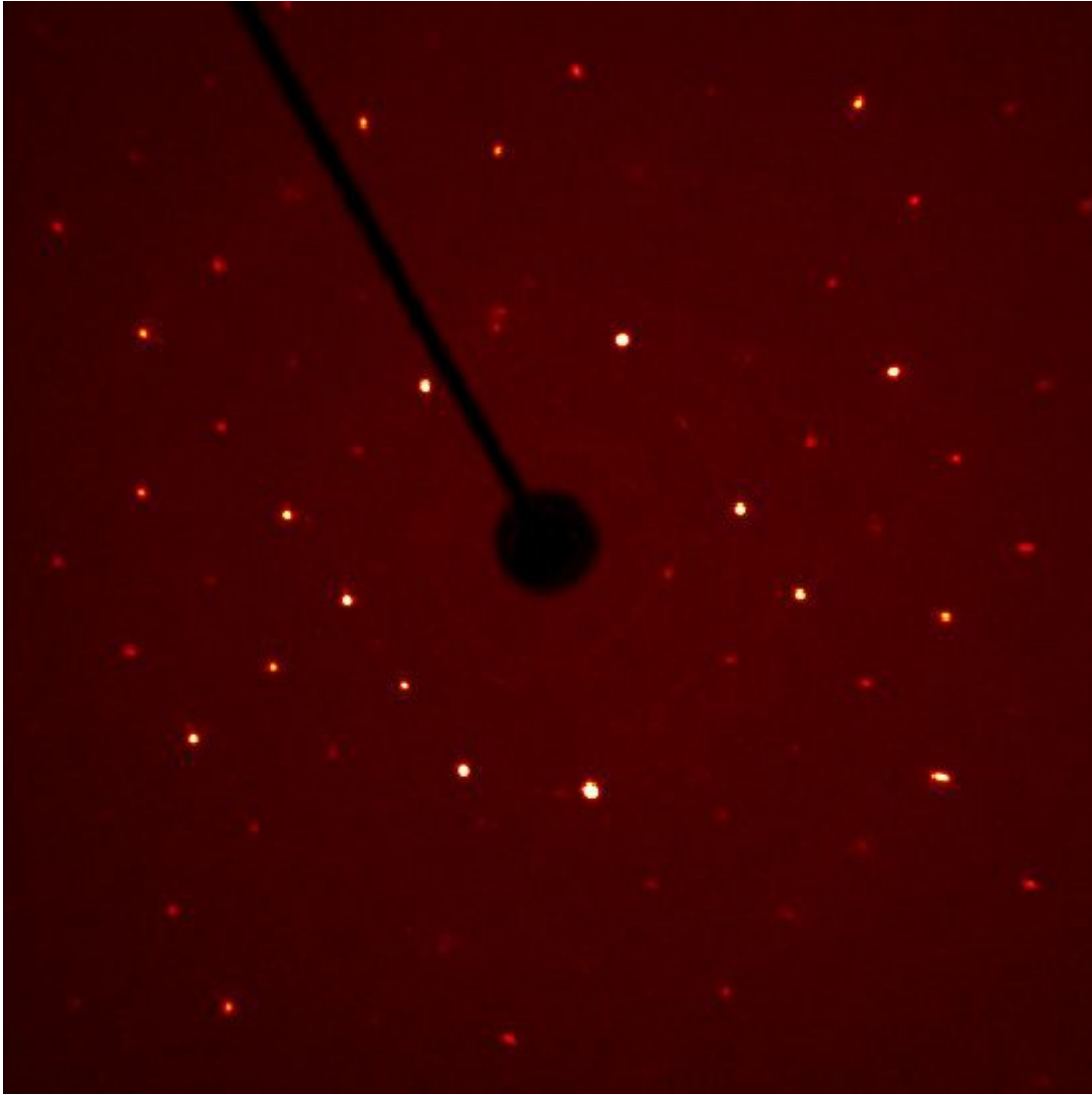


Рисунок 2: Пример картины дифракции на дифрактометре Bruker Apex II (данные автора)

В результате накапливается набор данных по углам отклонения пучка, т. е., с учётом известных расстояний от образца до детектора, набор значений  $\Delta \vec{k}$ . По условию дифракции каждое из этих значений соответствует какому-то вектору обратной решётки  $\vec{G}$ . Причём, так как все повороты кристалла известны, эти вектора известны в одной системе отсчёта. Для набора векторов  $\{\vec{G}\}$  необходимо подобрать вектора трансляции обратной решётки, по которым *все* определённые вектора разложатся целочисленным образом  $\vec{G} = n_1 \vec{a}^* + n_2 \vec{b}^* + n_3 \vec{c}^*$ . Найденная тройка векторов обратной решётки позволяет найти параметры прямой решётки и ориентацию векторов трансляции кристалла относительно дифрактометра. Анализ интенсивности брэгговских пиков позволяет определить дополнительно формфактор элементарной ячейки — то есть расшифровать расположение атомов внутри ячейки.

## Неупругие процессы с участием видимого света

Дифракция является упругим процессом рассеяния — энергия падающего и рассеянного света совпадает. Для изучения колебаний кристалла необходимо передавать этим колебаниям энергию или забирать ее — то есть нужны неупругие процессы. Эти процессы удобно рассматривать на языке рождения или уничтожения квантов упругих колебаний (фононов). В

принципе, аналогичные процессы возможны с рождением или уничтожением квантов колебаний магнитной структуры (магнонов) или других квазичастиц. При описании неупругого процесса должны выполняться закон сохранения энергии и квазиимпульса. Причём квазиимпульс сохраняется с точностью до вектора обратной решётки кристалла.

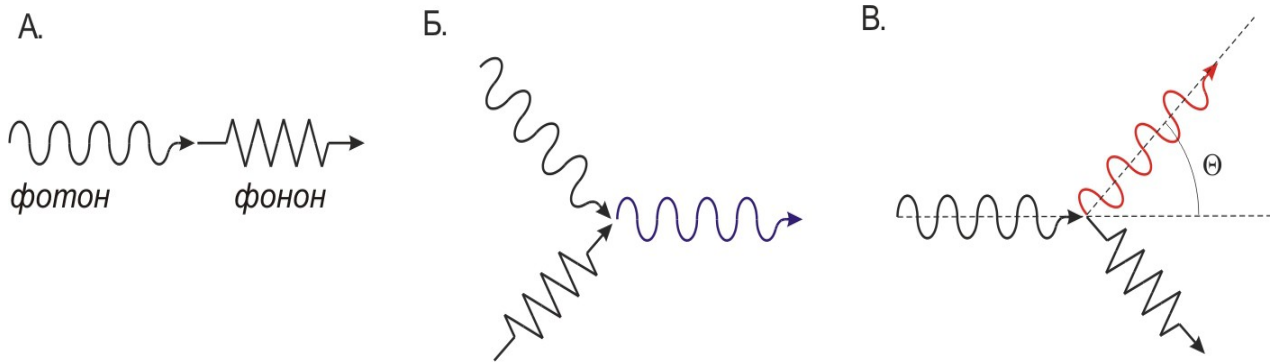


Рисунок 3: Неупругие процессы с участием фотона и фонона. А) Поглощение фотона, Б) и В) Комбинационное рассеяние.

Первым из неупругих процессов является поглощение света: фотон поглощается кристаллом, порождая фонон. Так как  $c \gg s$  такой процесс возможен только с рождением оптического фонона. Так как энергия оптического фонона соответствует обычно ИК диапазону ( $\lambda \sim 10000 \text{ \AA}$ ), то волновой вектор фотона  $K = \frac{2\pi}{\lambda} \ll \frac{2\pi}{a}$ . Поэтому рождаются только оптические фононы почти в центре зоны Бриллюэна и процессы переброса несущественны.

Вторым важным неупругим процессом с участием видимого света является комбинационное рассеяние. В этом случае фотон не пропадает, а рождает или поглощает фонон, соответственно меняя свой импульс или энергию. Так как при этом в опыте используется видимый свет (или близкий диапазон), то и волновой вектор фотона, и (по неравенству треугольника) волновой вектор фонона оказываются много меньше бриллюэновского. То есть, в комбинационном рассеянии света изучаются фононы в центре зоны Бриллюэна. Процессы переброса при этом также несущественны.

Традиционно различают рамановское рассеяние на оптических фононах и мандельштам-бриллюэновское рассеяние на акустических фононах. Это различие носит исторический характер, кроме того величина эффекта (и, следовательно, требования к оборудованию) существенно отличаются.

Для рамановского рассеяния (подробнее в [1]) изменение частоты фотона равно частоте оптического фонона:  $\Delta\omega = \Omega$  и для зелёного света  $\frac{\Delta\omega}{\omega} \sim 2 \cdot 10^{-3}$ .

Для мандельштам-бриллюэновского процесса (для определённости — с излучением фонона, рисунок 3-В) пишем законы сохранения:

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \hbar\omega' + \hbar\Omega \\ \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}' + \hbar\vec{K} \end{aligned}$$

С учётом показателя преломления кристалла  $n$  и малого изменения частоты:

$$\vec{K}^2 = (\vec{k} - \vec{k}')^2 = 2\omega^2 \left(\frac{n}{c}\right)^2 (1 - \cos\Theta)$$

Так как в центре зоны Бриллюэна  $K = \frac{\Omega}{s} = \frac{\Delta\omega}{s}$ , то окончательно получаем для сдвига частоты, наблюдаемого под углом  $\Theta$  к направлению падения:

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = 2 \frac{ns}{c} \sin \frac{\Theta}{2}$$

Эффект оказывается мал в меру малости  $s \ll c$ , его относительная величина порядка  $10^{-5}$ , то есть на два порядка меньше, чем для рамановского рассеяния.

Пример эксперимента по исследованию мандельштам-бриллюэновского рассеяния на кристалле RbCl из работы [2] представлен на рисунке 4. Для обеспечения высокой монохроматичности света использовался лазер, для обеспечения высокого спектрального разрешения — дифракционные решётки высокого качества и большое плечо дифрактометра (более 10 метров на проход). Результатом измерения при разных направлениях падения света на исследуемый монокристалл является зависимость скорости звука от направления распространения рождаемого фонона, а также *явное* наблюдение существования акустических фононов двух типов, соответствующих разной поляризации колебаний.

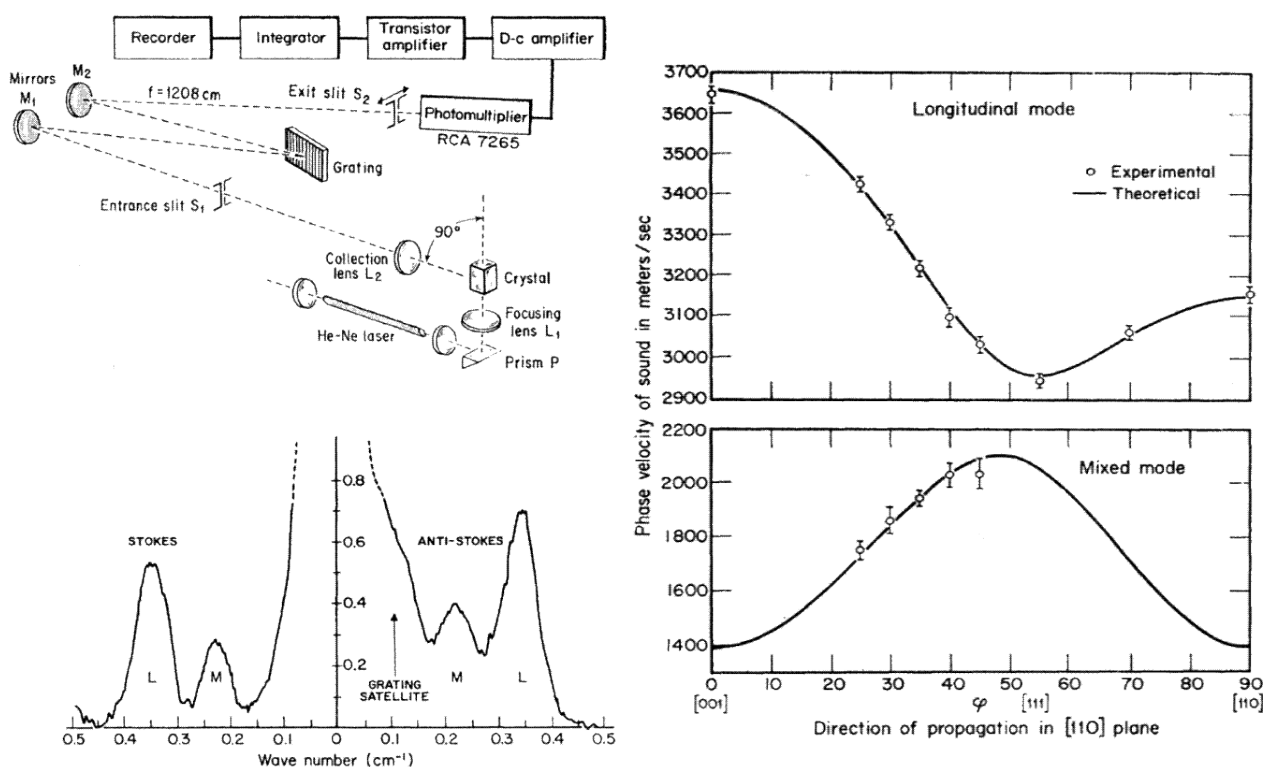


Рисунок 4 Слева сверху: схема экспериментальной установки по исследованию комбинационного рассеяния света. Слева внизу: запись спектра рассеянного света. Справа: восстановленная зависимость скорости звука от направления распространения фонона для двух поляризаций фононов. Из статьи [2].

## Неупругое рассеяние нейтронов

Одним из методов, позволяющим реально проследить весь спектр квазичастиц по всей первой зоне Бриллюэна (а как правило и во второй, и в третьей зонах) является неупругое рассеяние нейтронов. Аналогичная информация может быть получена и методом неупругого рассеяния рентгеновского излучения, некоторые подробности изложены в [1].

Напомним, что нейтрон это нейтральная, нестабильная в свободном состоянии частица (время полураспада около 800 секунд). Нейтрон взаимодействует с веществом за счёт сильного, но короткодействующего, ядерного взаимодействия с ядрами вещества и слабого, но дальнедействующего, магнитного диполь-дипольного взаимодействия с магнитными моментами атомов. По случайным причинам оказывается, что эффективность этих двух взаимодействий (сечение взаимодействия) примерно одинакова. Это позволяет одинаково

эффективно применять методы нейтронной дифракции и неупругого рассеяния нейтронов как к изучению кристаллов и упругих колебаний, так и к изучению магнитноупорядоченных структур и элементарных возбуждений магнетиков (магнонов).

При неупругом рассеянии нейтронов необходимо выполнение закона сохранения энергии и квазиимпульса. Для процессов рождения квазичастицы с энергией  $\hbar\Omega$  и квазиимпульсом  $\hbar\vec{K}$  они имеют вид:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m} + \hbar\Omega$$

$$\vec{k} = \vec{k}' + \vec{K} + \vec{G}$$

Дебройлевская длина волны нейтрона  $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{9.04 \text{ \AA}}{\sqrt{E(\text{мэВ})}}$ , то есть для получения длин волн сравнимых с типичным межатомным расстоянием (что необходимо для дифракции и для того, чтобы волновой вектор нейтронов был сравним с бриллюэновским) требуется энергия порядка или меньше 100 мэВ. Эти нейтроны всегда нерелятивистские, однако их скорости достаточно высоки (скорость нейтрона с длиной волны 5 Å составляет около 800 м/сек), чтобы на временах движения нейтронов по установке не учитывать конечность их времени жизни.

Получение интенсивных потоков нейтронов требует специальной инфраструктуры. Эта инфраструктура имеется в специализированных (часто международных) исследовательских центрах, таких как Институт Лауэ-Ланжевена (ILL) в Гренобле (Франция) [3] или Институт Поля Шерера (PSI) в Виллигене (Швейцария) [4]. «Сердцем» такого центра является источник нейтронов. В качестве источника используется либо ядерный реактор, в котором идёт цепная реакция деления, производящая нейтроны с энергией порядка 100 МэВ при каждом акте деления ядра, либо ускоритель протонов, бомбардирующий мишень из тяжёлых элементов (англ. spallation source): при попадании протона с энергией около 1 ГэВ ядро переходит в возбуждённое состояние и избавляется от избытка энергии испусканием нескольких (~30 для ядра свинца) протонов и нейтронов. Однако, получаемые таким образом нейтроны слишком быстрые, для их использования в дифракционном эксперименте необходимо понизить их энергию до сотен миллиэлектронвольт, чтобы дебройлевская длина волны сравнялась с межатомным расстоянием. Для этого поток нейтронов направляют в модератор — во многих случаях в качестве модератора используется танк с тяжёлой водой, где за счёт столкновений с другими ядрами нейтрон отдаёт избыток энергии и термализуется до равновесных тепловых энергий. Полученные таким образом тепловые нейтроны направляются к установкам.

Классической схемой неупругого рассеяния является схема трёхосного дифрактометра (рисунок 5). Трёхосной схема называется так как на пути от источника к детектору излучение трижды поворачивается вокруг некоторых «осей» установки. Первой «осью» является монохроматор — кристалл, сориентированный так, что один из пиков брэгговского рассеяния на нужной нам длине волны приходится в направлении на образец. При неупругом рассеянии на образце изменяется энергия и направление распространения нейтронов. Направление в котором детектируются рассеянные нейтроны фиксируется геометрией эксперимента (углом  $\Theta$  на рисунке 5), образец является второй «осью» поворота пучка. Для того, чтобы зафиксировать изменение энергии при рассеянии на пути рассеянного пучка ставится анализатор — кристалл принципиально аналогичный монохроматору, который также за счёт брэгговского отражения выделяет желаемую длину волны. Анализатор является третьей «осью» схемы, после него устанавливается детектор, который определяет интенсивность рассеянного пучка нейтронов с заданным изменением направления распространения (угол



$\Theta$  ) и заданным сдвигом энергии (определяемом ориентациями монохроматора и анализатора по отношению к падающему на них пучку). По этим параметрам может быть извлечена частота фонона (или другого элементарного возбуждения) и (с точностью до вектора обратной решётки) его квазиимпульс. В ходе эксперимента изменяется ориентация анализатора относительно образца (угол  $\Theta$ ) и ориентация анализатора относительно падающего пучка (то есть изменение частоты при неупругом рассеянии).

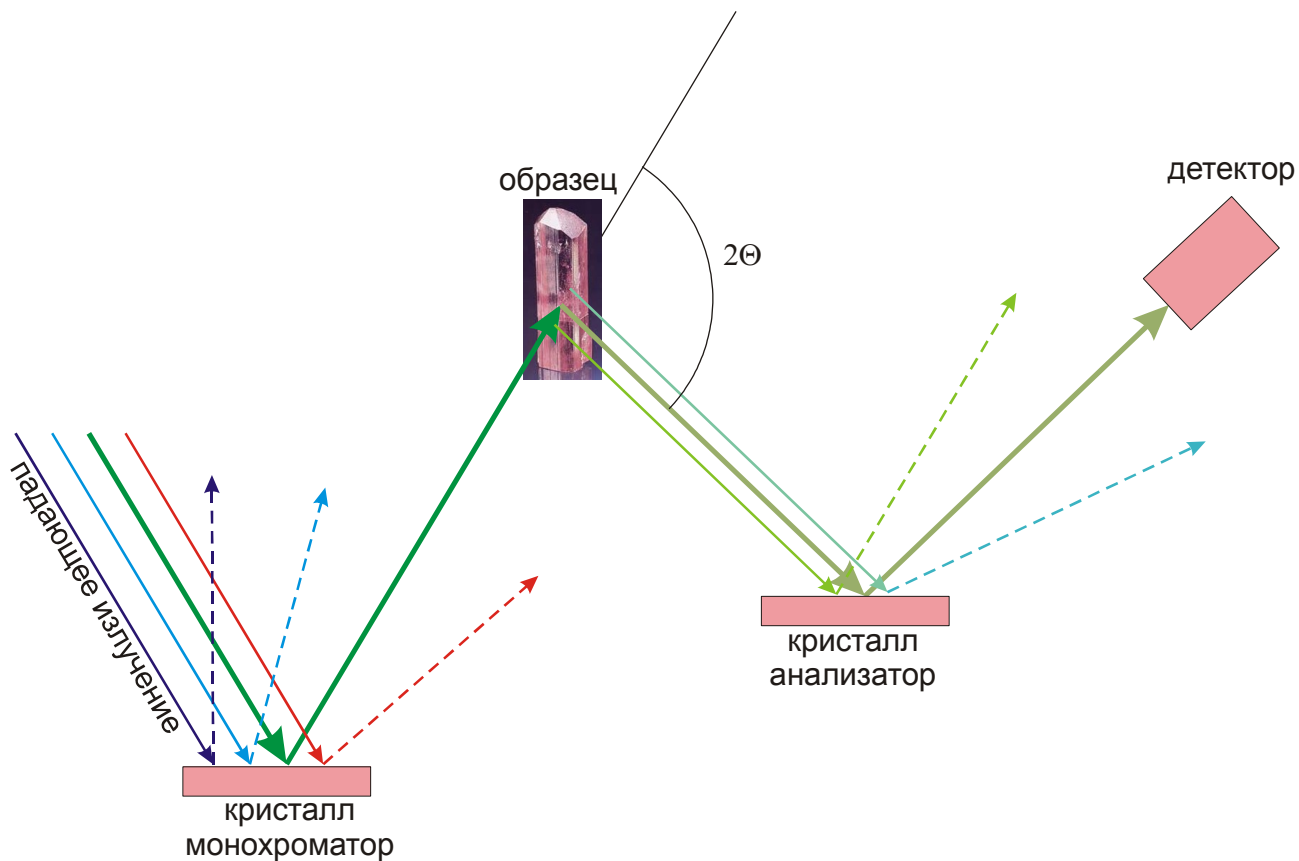


Рисунок 5: Схема эксперимента по неупругому рассеянию излучения на трёхосном дифрактометре. Коллиматоры, выделяющие желаемое излучение после монохроматора и анализатора не показаны. Изображение "образца" на схеме - фотография розового топаза с сайта Минералогического музея РАН.

Изображение экспериментального зала Института Поля Шерера и реального трёхосного дифрактометра показаны на рисунке 6.

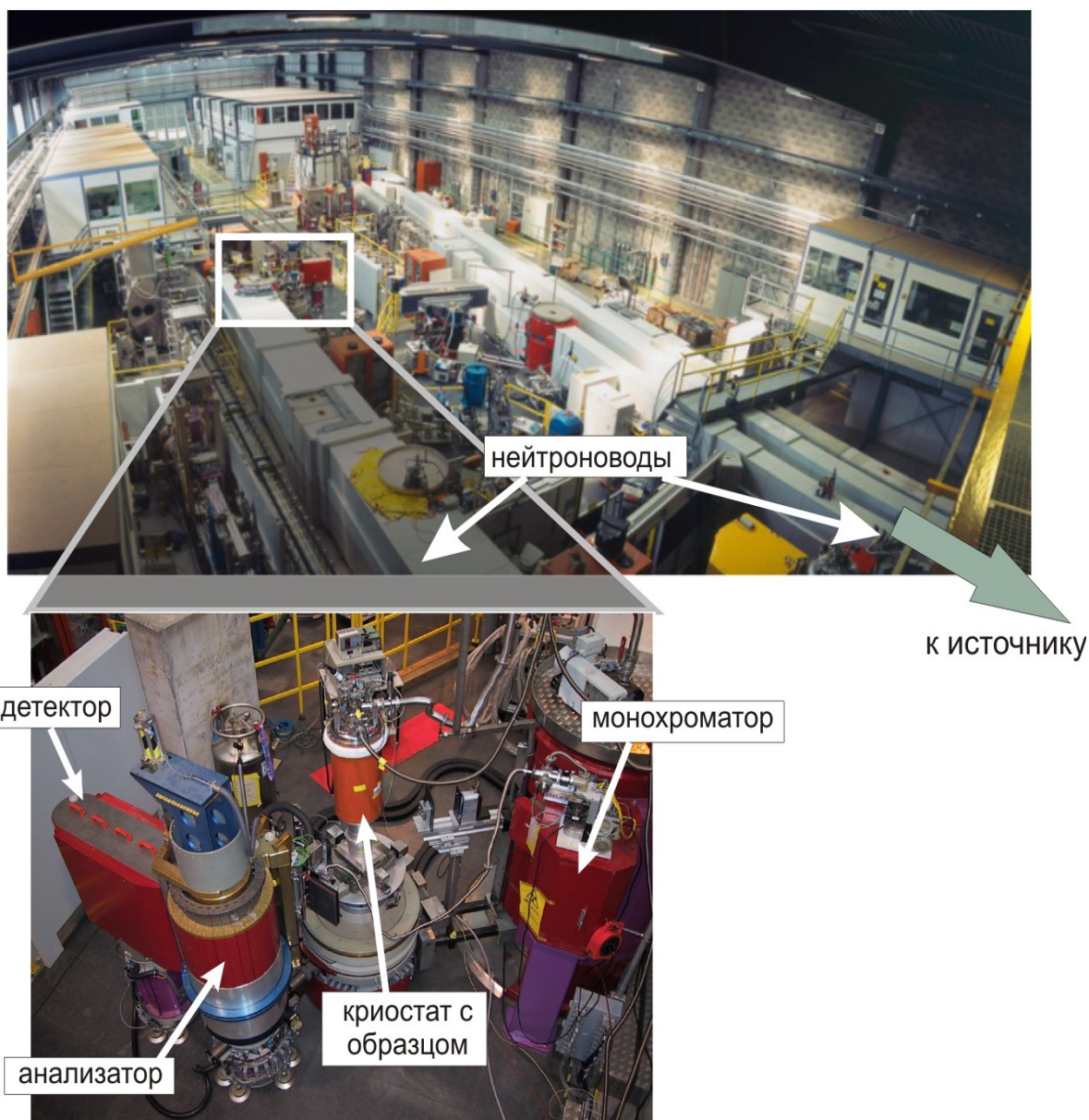


Рисунок 6: Экспериментальный зал источника нейтронов SINQ Института Поля Шерера (Виллиген, Швейцария). С сайта [4].

Пример экспериментальных данных по неупругому рассеянию нейтронов на фононах в кристалле аргона из работы [5] показан на рисунке 7.

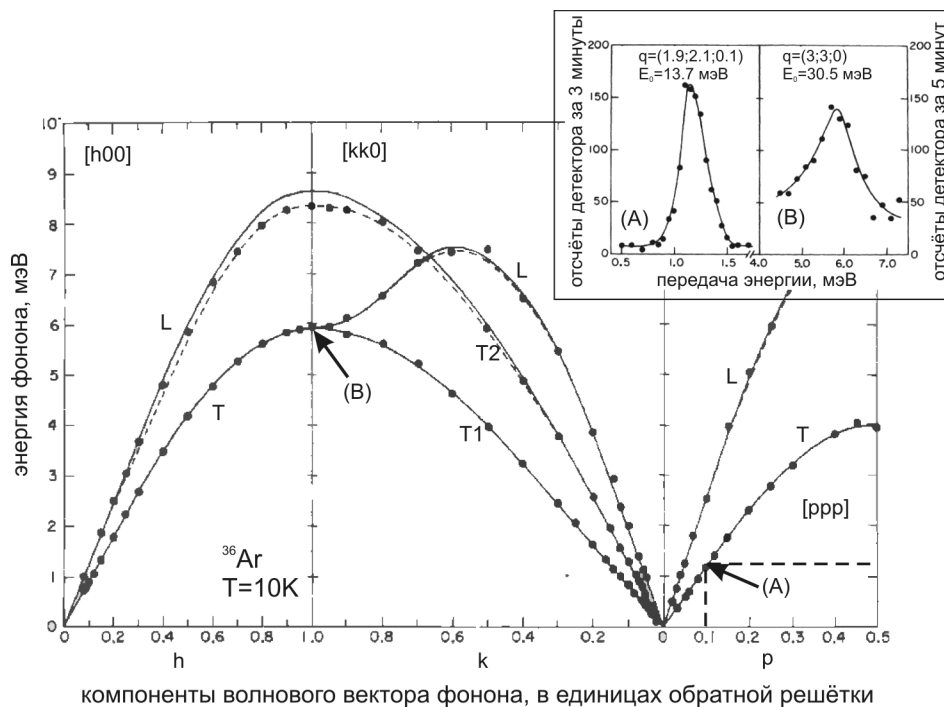


Рисунок 7 Восстановленный по результатам эксперимента спектр фононов в кристалле аргона вдоль направлений  $[100]$ ,  $[110]$  и  $[111]$ . Символы — экспериментальные данные, кривые — модельное описание с учётом взаимодействия ближайших соседей, соседей следующих за ближайшими и следующих (третьих) соседей. Продольные и поперечные моды отмечены буквами L и T (T1 и T2), соответственно. На вставке: пример зависимости интенсивности отсчётов детектора от изменения энергии нейтрона при фиксированном изменении импульса нейтрона. Буквами (A) и (B) отмечены положения соответствующих точек на основном графике. На основе рисунков из статьи [5].

Экспериментально наблюдается резонансный рост числа нейтронов, рассеянных с некоторой передачей энергии и импульса образцу. Этот рост интерпретируется, как рождение квазичастицы с соответствующей энергией и импульсом. Серии таких измерений позволяют проследить полный спектр возбуждений по всей первой зоне Бриллюэна. В частности, можно непосредственно определить различие между акустическими фононными модами разных поляризаций (продольная мода оказывается более «жесткой» в соответствии с общими предсказаниями теории упругости, упоминавшимися на первых лекциях).

## Методы изучения поверхности Ферми

### Внешний фотоэффект, зонная структура и энергия Ферми

Напомним, что при внешнем фотоэффекте в металлах спектр (распределение по энергии) фотоэлектронов оказывается связан с зонной структурой металла. Действительно, металл является «потенциальной ямой» для электронов — иначе делокализованные электроны самопроизвольно бы вылетали из металла. То есть, максимальная энергия (при  $T=0$ ) электронов в металле (положение уровня Ферми) должна быть меньше, чем минимальная энергия свободного электрона в вакууме (состояние покоящегося электрона в вакууме). Расстояние от уровня Ферми до минимальной энергии свободного электрона в вакууме и есть работа выхода: она равна минимальной энергии фотона, поглотив который электрон покинет металл.

Однако в металле есть и заполненные электронные состояния с энергией, меньшей энергии Ферми. Эти состояния имеют энергии вплоть до дна частично заполненной зоны. И, в принципе, есть и глубокие полностью заполненные зоны. Если энергия кванта света будет достаточна, чтобы выбить из металла электроны из-под поверхности Ферми или из глубоких зон — такие фотоэлектроны тоже будут присутствовать в спектре.

При облучении катода светом с энергией кванта  $h\nu > A_{\text{вых}}$ : электроны, выбиваемые с поверхности Ферми имеют максимальную энергию  $E_{\text{max}} = h\nu - A_{\text{вых}}$ , электроны, энергия которых на  $h\nu - A_{\text{вых}}$  меньше энергии Ферми покидают катод с нулевой энергией. Распределение фотоэлектронов по энергиям оказывается очевидным образом связано с числами заполнения соответствующих состояний и с плотностью состояний при этих энергиях электронов (рисунок 8) [6].

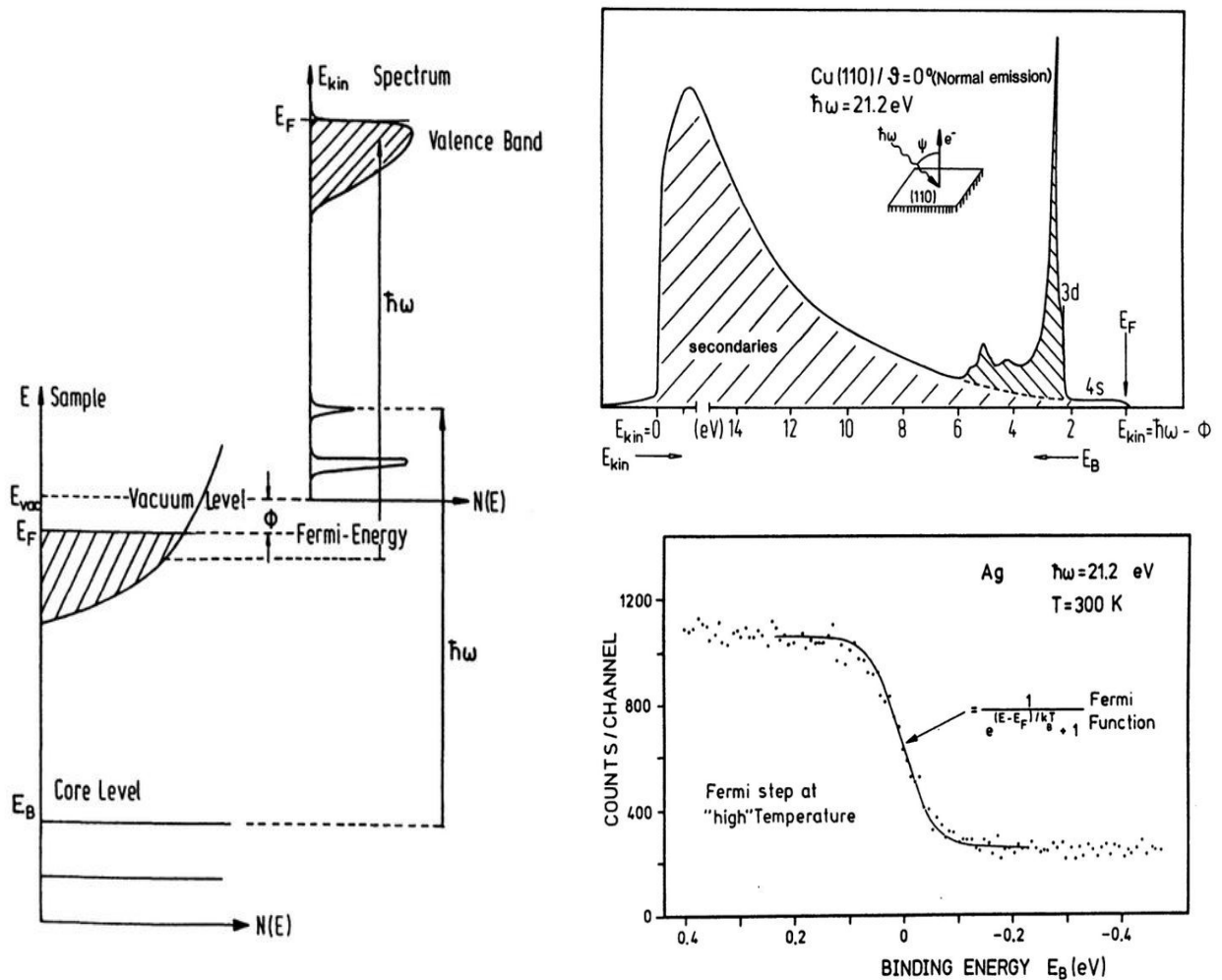


Рисунок 8 Слева: схема спектра электронов в металле и связь спектра электронов в металле с энергетическим спектром фотоэлектронов. Справа сверху: пример спектра фотоэлектронов из медного катода при освещении источником ультрафиолетового света с энергией кванта 21.2эВ. Справа внизу: граница спектра фотоэлектронов из серебряного фотокатода, отражающая форму функции распределения при комнатной температуре. Из книги [6].

В реальном металле (рисунок 8) картина распределения фотоэлектронов по энергии оказывается более сложной: при достаточно большой энергии кванта возможен не только фотоэффект из «моря» свободных электронов, но и выбивание остающихся локализованными электронов или электронов глубоко лежащих валентных зон. Кроме того, из-за конечности глубины проникновения излучения в материал катода, может оказаться, что получивший энергию фотона электрон имеет достаточно энергии, чтобы не только самому покинуть фотокатод, но и выбить один или несколько вторичных электронов. Это приводит к появлению на спектре фотоэлектронов узких пиков, связанных с локализованными электронами и дополнительного фона вторичных фотоэлектронов. Детальный анализ этих данных выходит за рамки нашего изложения, отметим здесь только, что для фотоэлектронов с максимальной кинетической энергией — то есть электронов, выбитых с самых высокоэнергетических состояний вблизи поверхности Ферми — функция распределения фотоэлектронов по энергии в точности описывается «ступенькой» распределения Ферми-Дирака с температурой опыта (рисунок 8).

## Метод ARPES

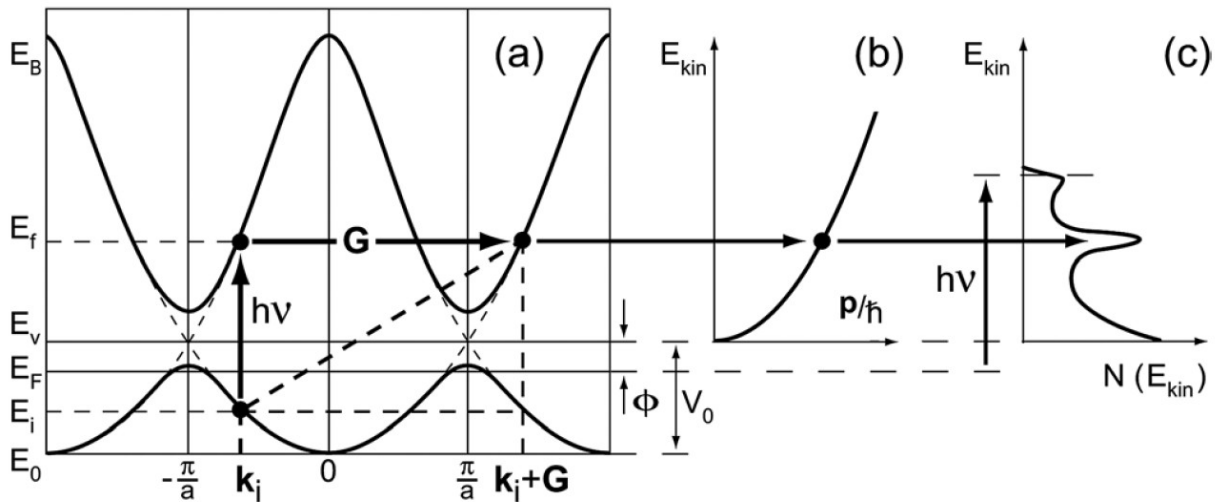


Рисунок 9: Схема резонансного поглощения фотона. (a) Переход электрона в более высокую энергетическую зону в представлении периодической зонной схемы. (b) Квадратичный спектр электрона в вакууме. (c) Схема распределения фотоэлектронов по энергии с резонансным пиком. Обозначения:  $E_0$  - дно зоны проводимости,  $E_i$  - энергия исходного состояния электрона,  $E_f$  - энергия конечного состояния электрона,  $E_F$  - уровень Ферми,  $E_v$  - положение нуля энергии электрона в вакууме,  $G$  - вектор обратной решётки,  $h\nu$  - энергия фотона. Из статьи [7].

В методе фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (англ. ARPES от Angular Resolved PhotoEmission Spectroscopy) фотоэлектроны дополнительно анализируются по направлению их движения. Это позволяет определить не только интегральную характеристику плотности состояний, а непосредственно определить форму закона дисперсии  $E(\vec{k})$ .

В методе APRES [7] используются фотоны большой энергии (жесткий ультрафиолет или даже мягкое рентгеновское излучение), что позволяет индуцировать переходы электронов в следующие энергетические зоны. В результате возникают резонансные процессы, когда после поглощения фотона электрон попадает в одно из высокоэнергетических блоховских состояний. Этот электрон далее может достичь поверхности образца и вылететь через неё наружу. Такую эмпирическую схему процесса фотоэмиссии называют трёхшаговым процессом (резонансное поглощение с переходом в высокую зону, движение к поверхности, выход из образца).

Напомним, что вплоть до энергий рентгеновского излучения порядка килоэлектронвольт волновой вектор фотона оказывается много меньше бриллюэновского. Поэтому при поглощении фотона квазиимпульс электрона практически не изменяется: резонансное поглощение электроном с волновым вектором  $\vec{k}$  фотона с частотой  $\omega$  происходит только если в какой-то из энергетических зон состояние с тем же волновым вектором (в приведённой зонной схеме) будет иметь энергию на  $\hbar\omega$  большую. Получившиеся электроны в высокоэнергетическом состоянии свободно распространяются по кристаллу и достигают поверхности. Поэтому их доля в общем количестве фотоэлектронов возрастает и формируется резонансный пик в распределении фотоэлектронов по энергии.

В то же время, как было видно для вычисления зонной схемы в модели почти свободных электронов, запрещённые зоны между высокоэнергетичными разрешёнными зонами

определяются взаимодействием с более и более далёкими соседями и спектр электрона становится близок к спектру свободной частицы. Таким образом, при резонансном поглощении фотона большой энергии можно считать, что связь энергии и квазиимпульса после поглощения будет близка к квадратичному закону для свободной частицы.

Наконец, отметим, что такой процесс поглощения наглядно представляется в расширенной (или периодической) зонной схеме (рисунок 9). При этом к квазиимпульсу добавляется нужное число векторов обратной решётки, чтобы сместить его на ветвь практически совпадающую со спектром свободной частицы. Тогда конечная энергия электрона

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_i + G)^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \left( (k_{\perp}^{(cr)})^2 + (k_{\parallel}^{(cr)})^2 \right)}{2m} = E_i + h\nu \ .$$

При пересечении границы металла составляющая квазиимпульса, параллельная поверхности не меняется (условие согласования по фазе блоховской волны в кристалле и волны де Бройля во внешнем пространстве):  $k_{\parallel}^{(cr)} = k_{\parallel}^{(vac)}$ , где индексы  $(cr)$  и  $(vac)$  отмечают волновые вектора в кристалле и в вакууме, соответственно. Изменение перпендикулярной компоненты может быть описано в предположении, что высокоэнергетичное состояние электрона

описывается моделью свободной частицы: 
$$\frac{\hbar^2 (k_{\perp}^{(cr)})^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_{\perp}^{(vac)})^2}{2m} + A_{вых} \ .$$

Для восстановления спектра по экспериментальным данным нужно обратить наши рассуждения. Измерив энергию фотоэлектрона и угол вылета фотоэлектрона в резонансном пике, можно восстановить его волновой вектор в вакууме. Зная работу выхода, можно отсюда получить волновой вектор в кристалле. Этот волновой вектор нужно оттранслировать в первую зону Бриллюэна. Зная энергию падающего фотона, мы можем получить энергию исходного состояния. Таким образом, мы получаем одну из точек электронного спектра  $E(\vec{k})$  .

Изменяя угол, под которым вылетают детектируемые фотоэлектроны, и энергию падающих фотонов, можно восстановить полную картину спектра  $E(\vec{k})$  для изначально заполненных состояний. Так как таким образом можно исследовать только состояния в которых есть электроны, то мы автоматически получим и поверхность Ферми.

Рассмотрим кратко реальную постановку эксперимента. Обычно в методе ARPES используют фотоны с энергией до 100эВ, источником которых является лазер, газоразрядная лампа, либо синхротронное излучение. Последний вариант обеспечивает наибольшую гибкость, позволяя непрерывно изменять частоту фотонов. Схема такой установки показана на рисунке 10, фотография одной из реальных установок — на рисунке 11.

Ультрафиолетовое излучение от одной из линий синхротронного источника монохроматизируется дифракционной решёткой (plane gratings) и фокусируется на образец. Образец ориентируется относительно детектирующей системы удобным образом (так как на малых энергиях фотона его волновой вектор не входит в уравнения нашей задачи, угол падения не важен), что позволяет выделить фотоэлектроны с определённым направлением импульса. Фотоэлектроны собираются системой электростатических линз и попадают в анализатор, где по разному отклоняются магнитным полем в зависимости от угла вылета и энергии. Распределение электронов на детекторе позволяет восстановить информацию об энергии и направлении вылета фотоэлектронов, откуда, как мы уже рассмотрели, находится спектр электронов.



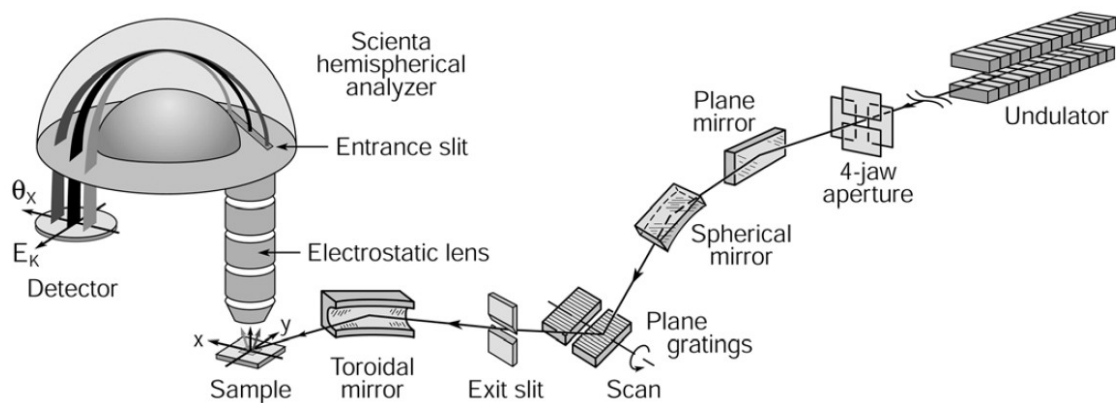


Рисунок 10: Схема установки для фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением. Из статьи [7].

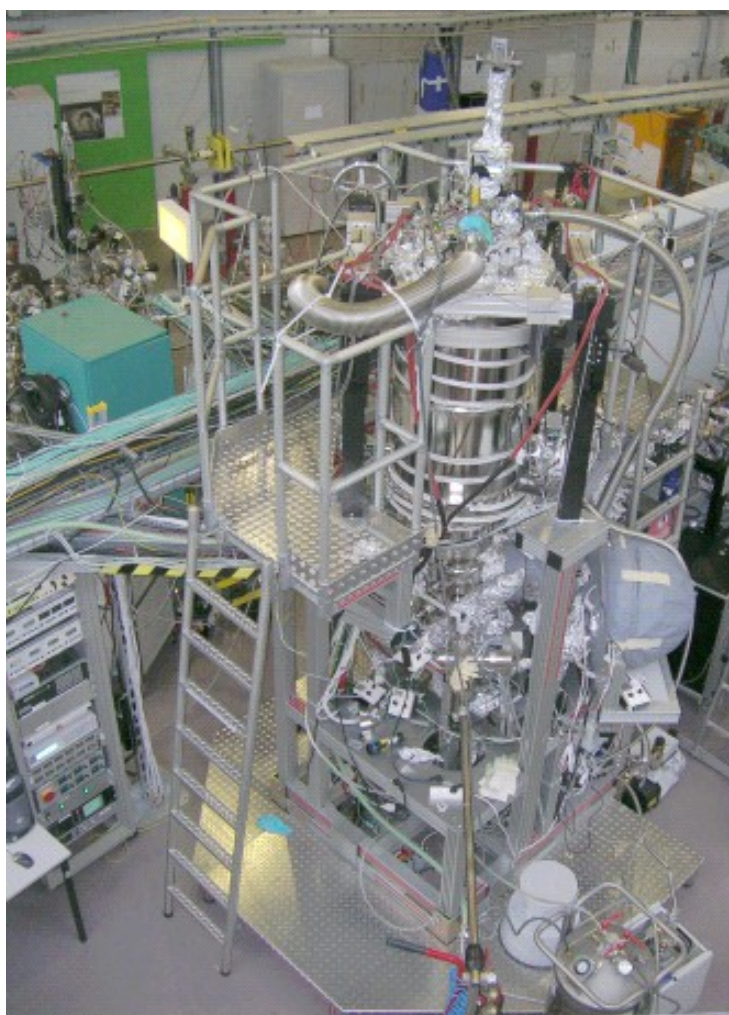


Рисунок 11: Фотография установки для фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением на синхротроне BESSY (Берлин). Установка позволяет достигать монохроматичности фотонов в пределах 1 мэВ, анализировать энергию фотоэлектронов с разрешением 1 мэВ и проводить исследования при температуре ниже 1К. Из презентации проф.С.В.Борисенко (IFW-Dresden).



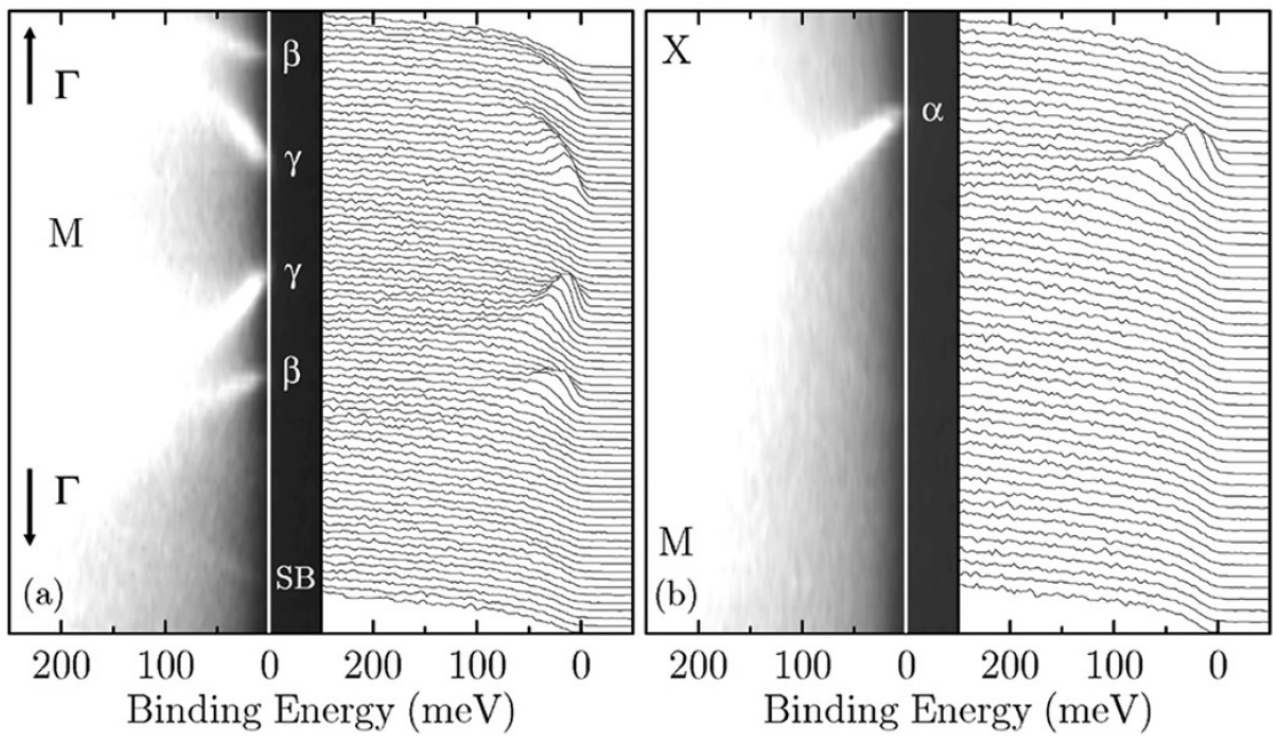


Рисунок 12 Серии распределения фотоэлектронов по энергии для различных импульсов фотоэлектронов. Рисунки (a) и (b) соответствуют сканированию вдоль направлений  $\Gamma$ -M- $\Gamma$  и M-X в k-пространстве. Энергия падающих фотонов 28 эВ. Температура 10К. Из статьи [7].

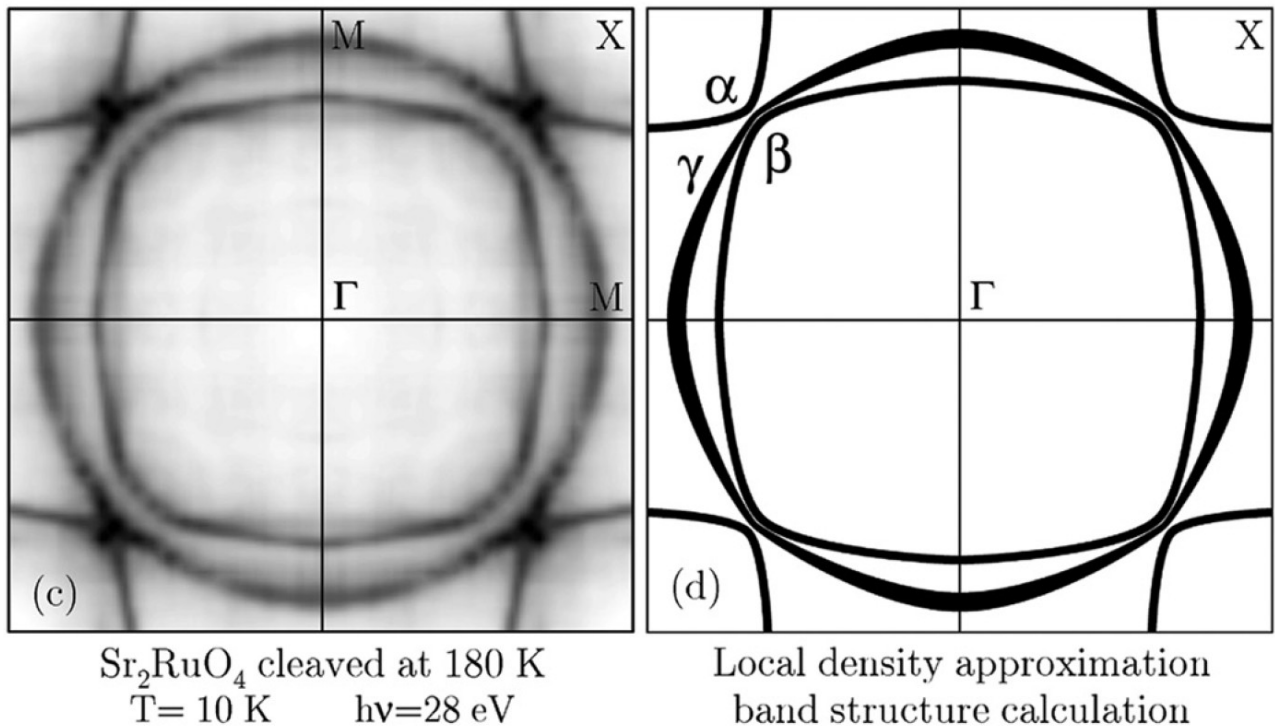


Рисунок 13 Слева: экспериментально измеренное методом ARPES сечение ферми-поверхности. Справа: расчёт зонной структуры. Из статьи [7].

В качестве примера экспериментальных данных приведём данные по сверхпроводящему соединению  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  [7]. В этом соединении (переходящем при низкой температуре  $T_c \approx 1 \text{ K}$  в сверхпроводящее состояние необычного типа [8]) уровень химпотенциала пересекает три энергетические зоны, что приводит к формированию сложной ферми-поверхности из трёх «листов». Проводящие свойства этого соединения связаны с двумерными слоями рутения и кислорода в кристаллографической плоскости (ab), такая двумерная структура проводящих слоёв родственна сверхпроводящим ВТСП-купратам. Поэтому геометрия ферми-поверхности в основном определяется проекцией волнового вектора электрона на плоскость проводящего слоя, что делает задачу в каком-то смысле двумерной и облегчает интерпретацию данных.

На рисунке 12 показаны серии спектров фотоэлектронов для разных углов вылета из образца (угол вылета откладывался так, что проекция волнового вектора электрона на плоскость двумерных слоёв сканировала k-пространство в направлениях  $\Gamma-M-\Gamma$  и  $M-X$  по рисунку 13). Энергия фотона в этих опытах составляла 28эВ. Каждый спектр — это зависимость от энергии числа фотоэлектронов с такой энергией, распространяющихся в выбранном направлении. На распределении фотоэлектронов по энергии наблюдается плавное нерезонансное возникновение фототока на нулевой (по шкале рисунка 12) энергии. Эта точка соответствует фотоэлектронам выбитым с самой поверхности Ферми, они имеют наибольшую энергию из всех фотоэлектронов. Так как энергия фотона известна, по этой точке можно определить работу выхода. Смещение нуля отсчёта энергии в эту точку означает измерение энергии электронов в образце «вглубь» от поверхности Ферми.

На распределении фотоэлектронов по энергии наблюдаются чёткие резонансные максимумы (рисунок 12) при определённых значениях угла вылета. Это именно те особенности, про которые мы говорили выше — энергия фотона совпала с расстоянием между ветвями спектра электрона, выбитые из своей зоны электроны попали в разрешённые состояния и достигают поверхности в большем количестве. Момент, когда резонансные максимумы попадают на энергию фотоэлектронов, соответствующую фотоэффекту с уровня Ферми, соответствует тому, что в этот момент энергии Ферми соответствуют электроны с совершенно чётко определёнными значениями волнового вектора — то есть найдена одна из точек ферми-поверхности. Проведя серию таких измерений в разных взаимных ориентациях образца и детектора можно восстановить ферми-поверхность (рисунок 13).

## Туннельный ток и плотность состояний на поверхности Ферми

В курсе квантовой физики 5 семестра обсуждался туннельный эффект — вероятность частице «переместиться» под потенциальным барьером. Этот эффект лежит в основе работы туннельного микроскопа. Рассмотрим, как наблюдаемый в реальном эксперименте туннельный ток между двумя металлами (ток между иглой туннельного микроскопа и исследуемым металлом) связан с характеристиками этих металлов.

Во-первых, отметим, что если туннельным промежутком разделены два металла (с разными значениями работы выхода), то становится выгодным переход электронов из металла с меньшей работой выхода в металл с большей работой выхода: во втором металле (с большей работой выхода) есть свободные электронные состояния с меньшей энергией. При этом нарушается электронейтральность металлов: у металла, из которого электроны уходят, возникнет положительный заряд, который «тянет» электроны обратно. В результате должна установиться *контактная разность потенциалов* между металлами, так что электрохимические потенциалы  $\tilde{\mu} = \mu - e\phi$ , где  $\phi$  — электростатический потенциал металла, а знак минус в явном виде выражает отрицательность заряда электрона, совпадают. В этом равновесном состоянии тока конечно нет.

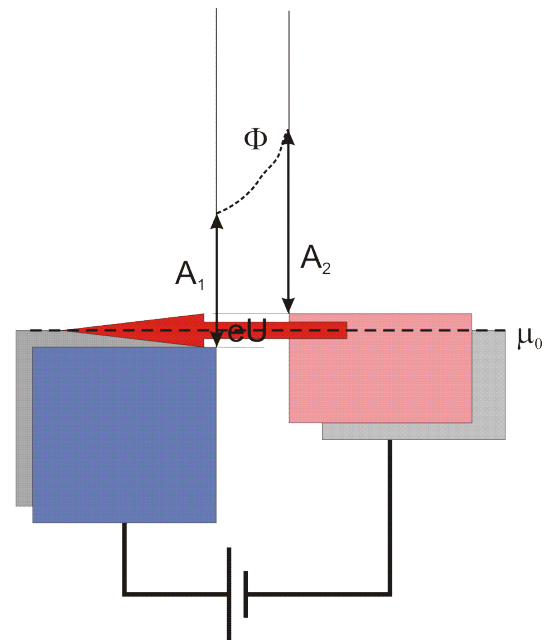
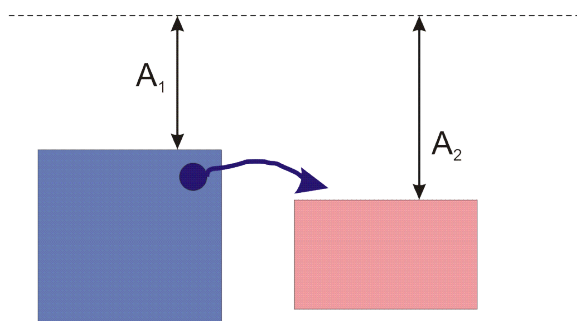
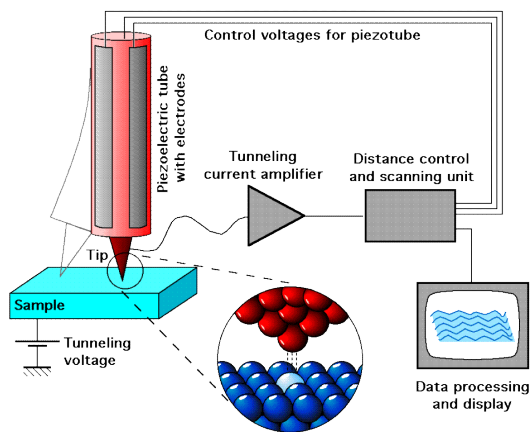


Рисунок 14 Слева сверху: схема работы туннельного микроскопа (рисунок с сайта [https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning\\_tunneling\\_microscope](https://en.wikipedia.org/wiki/Scanning_tunneling_microscope)). Слева внизу: установление контактной разности потенциалов на туннельном контакте разнородных металлов. Справа: возникновение туннельного тока при приложении к туннельному контакту. Пунктиром схематически показана форма туннельного барьера.

При подключении внешнего источника напряжения равновесие будет нарушено, зонные структуры в металлах будут смещены друг относительно друга на  $eU$ . Тогда возникает туннельный ток между металлами. Чему равен этот ток?

Он, конечно, определяется проницаемостью барьера  $T \approx \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int \sqrt{2m(\Phi(x)-E)} dx\right)$ .

Дальше нужно просуммировать вклады всех электронов в интервале энергий шириной  $eU$ , что включает и интегрирование по всем энергиям, и суммирование по всем электронам с данной энергией. Но число электронов с данной энергией есть по определению плотность состояний! Кроме того, из-за запрета Паули нам важно не только иметь электроны, готовые перейти через туннельный барьер, но и свободные места для этих электронов по другую сторону барьера. То есть, ток должен быть пропорционален произведению плотностей состояний по обе стороны от барьера.<sup>1</sup>

Для случая металла напряжения на туннельном контакте малы по сравнению с шириной зоны, поэтому можно считать, что для всех электронов в интервале шириной  $eU$  плотности состояний одинаковы и равны плотности состояний на поверхности Ферми

<sup>1</sup> Другим аргументом является то, что при смене полярности напряжения туннельный ток меняться не должен. Следовательно, плотности электронных состояний по обе стороны от барьера должны входить симметрично в выражение для туннельного тока.

$D(E_F^{(1),(2)})$ . Таким образом, туннельный ток между двумя металлами  $I \propto D(E_F^{(1)})D(E_F^{(2)})T \times eU$ , где  $T$  — прозрачность барьера.

Таким образом, туннельный эксперимент может определить плотность состояний на поверхности Ферми. А, как мы помним из описания кинетических явлений, именно плотность электронных состояний на поверхности Ферми определяет проводимость, теплоёмкость и теплопроводность вырожденной ферми-системы.

## Циклотронные орбиты и их связь с геометрией поверхности Ферми

### Уравнение динамики для электрона в кристалле в магнитном поле.

Рассмотрим электроны в кристалле в достаточно слабых магнитных полях (или при достаточно высокой температуре). Критерий слабости строго определять не будем, на качественном уровне отметим, что так как в магнитном поле движение свободного электрона становится финитным (движение по окружности), то такое движение по общим правилам квантовой механики квантуется. Сейчас мы пренебрегаем этим квантованием, что соответствует тому, что температура больше расстояния между уровнями и тепловые флуктуации «замывают» квантовую картину. При этом часть квантовых явлений: вырождение электронного ферми газа в металле, особенности зонной структуры для электрона в кристалле сохраняется и существенно определяет свойства рассматриваемой системы.

Мы уже рассмотрели влияние электрического поля на электрон и показали, что квазиимпульс электрона подчиняется уравнению типа второго закона Ньютона:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e\vec{E}.$$

Как описать движение электрона в магнитном поле? Можно воспользоваться известным утверждением теории поля [9]: если в исходной системе отсчёта было магнитное поле<sup>2</sup>  $\vec{B}$ , а электрического не было, то в системе координат, движущейся со скоростью  $\vec{V}$  ( $V \ll c$ ) появится электрическое поле  $\vec{E} = \frac{1}{c}[\vec{V} \times \vec{B}]$ . Пересядем в систему отсчёта, движущуюся с групповой скоростью рассматриваемого электрона (представляемого в виде волнового пакета). В этой системе отсчёта электрон покоится (в этот момент мы и отбрасываем квантовые эффекты, оговорённые выше) и на него действует только электрическое поле, действие которого мы описывать умеем. Возвращаемся обратно в лабораторную систему отсчёта нерелятивистским ( $V \ll c$ ) преобразованием Галлилея и получаем:

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{c}[\vec{v}_{gp} \times \vec{B}].$$

Вспоминая определение групповой скорости  $\vec{v}_{gp} = \frac{d\varepsilon}{d\vec{p}} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \varepsilon(\vec{k})$ , где  $\vec{\nabla}_k \varepsilon$  - градиент от энергии в  $k$ -пространстве, получаем окончательно

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{e}{\hbar^2 c}[\vec{\nabla}_k \varepsilon \times \vec{B}].$$

Получившееся уравнение аналогично уравнению для свободного электрона, но вместо

2 Мы для простоты везде считаем, что магнитный момент среды мал, поэтому все граничные условия несущественно меняют картину поля в образце и различие между векторами индукции и напряжённости поля (в системе СГС) несущественно.

импульса стоит квазиимпульс, а вместо скорости — групповая скорость.

### **Траектория электрона в металле в магнитном поле.**

Из свойств векторного произведения следует, что в импульсном пространстве электрон движется перпендикулярно к градиенту энергии — то есть по поверхности постоянной энергии. Будет изменяться только компонента волнового вектора, перпендикулярная магнитному полю  $\vec{B}$ , компонента волнового вектора электрона, параллельная магнитному полю, не изменяется.

В металле электронный газ вырожден и основную роль играют электроны на ферми-поверхности. Траектория движения этих электронов в импульсном пространстве, отвечающая перечисленным ограничениям (постоянство энергии и неизменность составляющей волнового вектора, параллельной магнитному полю), будет, очевидно, сечением ферми-поверхности плоскостью, перпендикулярной к магнитному полю.

При этом оказывается принципиальной топология ферми-поверхности. Напомним, что самыми простыми<sup>3</sup> типами ферми-поверхности в металлах являются (причём иногда оба типа ферми-поверхностей присутствуют одновременно) ферми-поверхности электронного типа («капли» в  $k$ -пространстве, состояния *внутри* которых заполнены), дырочного типа («пузыри» в  $k$ -пространстве, состояния *вне* которых заполнены), а также открытые ферми-поверхности, которые мы специально рассматривать не будем<sup>4</sup>.

Рассмотрим перпендикулярные магнитному полю сечения ферми-поверхностей электронного и дырочного типа (рисунок 15). На этих поверхностях различаются направления групповой скорости для электрона и, следовательно, различаются направления вектора  $\frac{d\vec{k}}{dt}$ . То есть, направления движения электрона в импульсном пространстве оказываются различными. Это принципиально отличается от случая электрического поля, где все электроны одинаково смещаются вдоль поля.

---

3 Мы специально упрощаем рассмотрение. В реальных металлах (например меди) геометрия ферми-поверхности более сложная. Разные сечения ферми-поверхности меди (представляющей собой соединённые перетяжками сферы) имеют геометрию электронного или дырочного типа.

4 Открытые ферми-поверхности в простейшем случае это «трубки» в  $k$ -пространстве (бесконечные в представлении периодической зонной схемы), которые могут быть как электронными (заполнены состояния внутри трубок), так и дырочными (заполнены состояния вне трубок). С открытыми ферми-поверхностями связаны также интересные явления, рассказ о которых не укладывается в рамки нашего курса. Интересующиеся могут обратиться к литературе, например [10].

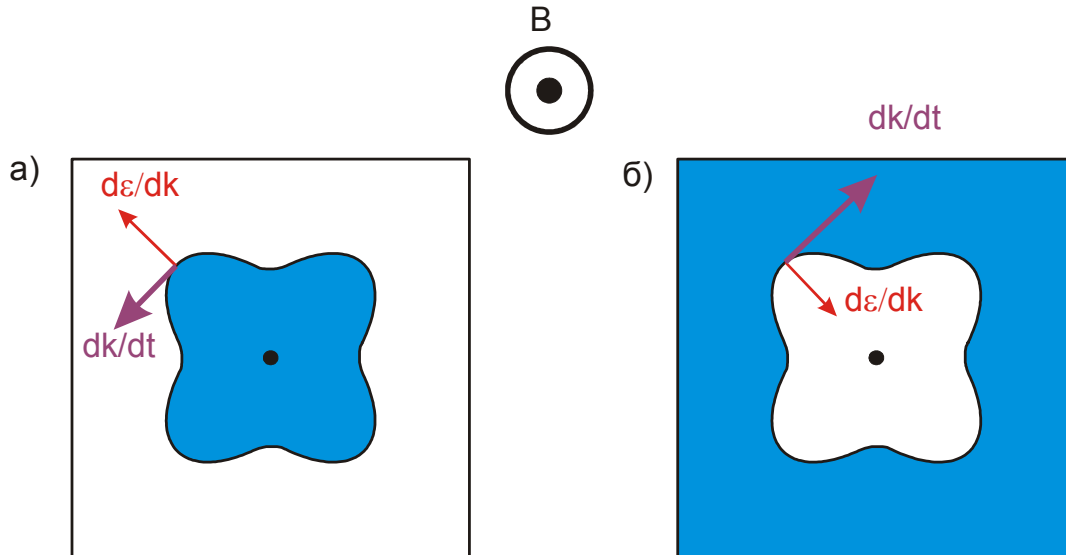


Рисунок 15: Определение направления движения электрона в магнитном поле на электронной (а) и дырочной (б) ферми-поверхности. Магнитное поле направлено из плоскости рисунка, синяя заливка показывает занятые состояния.

Формально, то что для частиц с одинаковыми значениями начального волнового вектора отличаются направления движения можно описать как различие знаков электрических зарядов частиц. Электрон на ферми поверхности дырочного типа с этой точки зрения движется так, как если бы у него был положительный заряд.

Найдём период вращения электрона по данному сечению ферми-поверхности. Определим вектор  $\vec{k}_\perp$  как проекцию волнового вектора на плоскость, перпендикулярную полю. За время  $\delta t$  этот вектор заметает площадь  $\delta \vec{S} = \frac{1}{2} \left[ \vec{k}_\perp \times \frac{d\vec{k}}{dt} \right] \delta t$ . Подстановкой уравнения динамики и применением формулы для двойного векторного произведения (пользуясь тем, что  $\vec{k}_\perp \perp \vec{B}$ ) получаем

$$\delta \vec{S} = \frac{e}{2\hbar^2 c} (\vec{k}_\perp \cdot \vec{\nabla}_k \varepsilon) \vec{B} \delta t$$

Интегрируя по периоду, находим период

$$T = \frac{2\hbar^2 c}{eB} \left| \oint \frac{\delta \vec{S}}{(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\nabla}_k \varepsilon)} \right|$$

он полностью определяется геометрией сечения ферми-поверхности<sup>5</sup>. Конечно, мы здесь

<sup>5</sup> Эта связь может быть выражена более наглядно, что однако не требуется в рамках курса, поэтому приводится здесь в ссылке. Рассмотрим подынтегральное выражение  $\frac{\delta S}{(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\nabla}_k \varepsilon)}$ . Для приращения

площади можно записать  $\delta S = \frac{1}{2} k_\perp^2(\varphi) \delta \varphi$ , где  $\varphi$  — азимутальный угол. В знаменателе стоит произведение  $\vec{k}_\perp$  на проекцию градиента энергии на это направление, эта проекция как производная по направлению может быть записана в виде  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_\perp}$ . Тогда

подынтегральное выражение принимает вид  $\frac{1}{2} k_\perp \frac{\partial k_\perp}{\partial \varepsilon} \delta \varphi = \frac{1}{2} \frac{\partial \delta S}{\partial \varepsilon}$ . Интегрирование тогда

считаем, что период движения электронов гораздо меньше времени свободного пробега, то есть процессы рассеяния не учитываются.

Для простого случая почти свободных электронов  $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  и  $(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\nabla}_{k\epsilon}) = \frac{\hbar^2}{m} (\vec{k}_\perp)^2$ , всякое сечение ферми-поверхности будет окружностью и  $\delta S = \frac{1}{2} (\vec{k}_\perp)^2 \delta\phi$ , откуда  $T = \frac{2\pi m c}{e B}$ .

Это движение электронов называют циклотронным, его частота  $\omega_c = \frac{e B}{m c}$  называется циклотронной частотой. Для поля 10 Тл (т.е.  $10^5$  Гс) циклотронная частота составляет (для массы свободного электрона)  $1.76 \cdot 10^{12}$  1/сек (280 ГГц).

Для ферми-поверхности сложного вида из интегрирования выйдет постоянная с размерностью массы, которую называют циклотронной массой, которая по определению связана с циклотронной частотой как  $\omega_c = \frac{e B}{m_c c}$ . Циклотронная масса для данного сечения

ферми-поверхности равна  $m_c = \frac{\hbar^2}{\pi} \left| \oint \frac{\delta \vec{S}}{(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\nabla}_{k\epsilon})} \right|$ . Отметим, что циклотронная масса

совпадает с эффективной массой только для квадратичного закона дисперсии, в произвольном случае она может отличаться от эффективной массы электрона.

В качестве простого примера несферической поверхности Ферми можно рассмотреть модельный случай ферми-поверхности цилиндрической формы  $\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2)$ .

Если поле приложено под углом  $\Theta$  к оси Z, то сечение ферми-поверхности, перпендикулярное полю, это эллипс площадью  $\pi k_F^2 / \cos\Theta$ . При заданном законе дисперсии групповая скорость всегда лежит в плоскости XY, поэтому удобнее рассматривать проекцию вектора  $\vec{k}_\perp$  на направление групповой скорости, которая всегда равна  $k_F$ .

Отсюда после несложных преобразований  $T = \frac{2\pi m c}{e B} \frac{1}{\cos\Theta}$ . Период вращения начинает зависеть от ориентации, что открывает возможность изучения геометрии ферми-поверхности.

Как будет двигаться наш электрон в реальном пространстве? Для ответа на этот вопрос в общем случае надо проинтегрировать по времени групповую скорость

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \int \vec{v}_{gp} dt.$$

Для простого случая сферической поверхности Ферми, можно заметить, что групповая скорость параллельна волновому вектору в эту же точку ферми-поверхности. Тогда, применяя полученные ранее результаты, получаем, что продольная к полю составляющая скорости не меняется, а для поперечной получим известное из классической механики

уравнение  $m^* \frac{d\vec{v}_\perp}{dt} = -\frac{e}{c} [\vec{v}_\perp \times \vec{B}]$  для случая электронной ферми-поверхности и с обратным

знаком для дырочной ферми поверхности. Это уравнение полностью аналогично уравнению для движения свободного электрона в магнитном поле, ответ нам известен: частица движется

по спирали вокруг силовых линий магнитного поля, радиус спирали  $r = \frac{m^* c}{e B} v_\perp = \frac{v_\perp}{\omega_c}$ . Для

---

тривиально  $T = \frac{\hbar^2 c}{e B} \left[ \frac{\partial S}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}$ . Получившаяся производная — это производная площади перпендикулярного полю сечения изоэнергетической поверхности по энергии.



электронов на ферми-поверхности этот радиус, называемый циклотронным радиусом, есть

$$r = \frac{\hbar c}{eB} k_F, \text{ для лабораторного поля } 10 \text{ Тл этот радиус оказывается порядка } 0.5 \text{ мкм.}$$

Циклотронный резонанс в металлах.

В магнитном поле около 0.1 Тл циклотронные частоты имеют порядок нескольких гигагерц, а циклотронный радиус оказывается порядка 50 мкм. В то же время, глубина скин-слоя в хороших проводниках на этой частоте оказывается порядка микрометра или даже меньше.

Это позволяет организовать следующий эксперимент. Приложим магнитное поле вдоль поверхности проводника и будем освещать поверхность электромагнитными волнами подходящей частоты. Так как циклотронный радиус гораздо больше глубины скин-слоя, то электроны взаимодействуют с переменным электромагнитным полем только вблизи поверхности и во время этого взаимодействия они ускоряются или замедляются электрическим полем волны (рисунок 16).

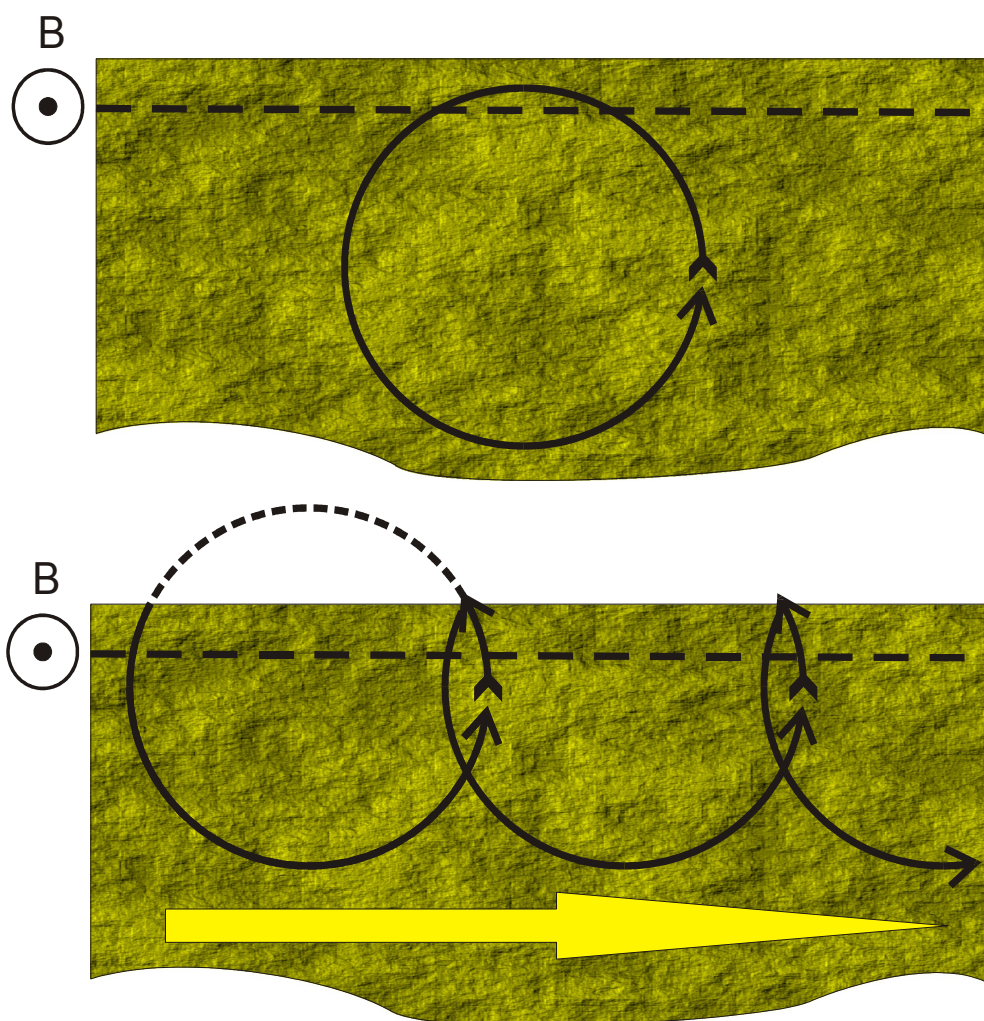


Рисунок 16: Схема траектории электрона в опытах по циклотронному резонансу. СВЧ излучение падает сверху, пунктирная линия условно показывает границу скин-слоя. Сверху: стационарная циклотронная орбита. Снизу: "скачущая" циклотронная орбита при упругом рассеянии на границе, стрелкой показано направление дрейфа ведущего центра.

Если период движения по циклотронной орбите окажется кратен периоду переменного СВЧ-поля  $\omega_c = \omega_{СВЧ} / n$  ( $n$  - целое), то однажды ускоренный полем электрон вернется в скин-слой «в нужный момент», когда направление электрического поля опять ускоряющее. Если



длина пробега электрона больше длины циклотронной орбиты, то электрон будет эффективно отбирать энергию у электромагнитной волны, которую потом отдаст при столкновениях в глубине металла. С точки зрения экспериментатора это означает, что при некоторых значениях магнитного поля (по техническим причинам удобнее поддерживать частоту СВЧ неизменной) будет наблюдаться резонансное поглощение падающих электромагнитных волн. Это явление называют циклотронным резонансом.

Значения полей резонансного поглощения образуют серию  $B_n = \frac{m_c c \omega_{СВЧ}}{e} \frac{1}{n}$ , из анализа периодичности зависимости поглощения от обратного поля можно найти циклотронную массу и из её анализа получить информацию о структуре ферми-поверхности. Пример таких данных для калия приведён на рисунке 17. Для калия ферми-поверхность близка к сфере и это подтверждается в этом эксперименте: наблюдаемая картина почти не меняется при изменении ориентации магнитного поля. Определённая по этим данным циклотронная масса составила 1.24 массы свободного электрона.

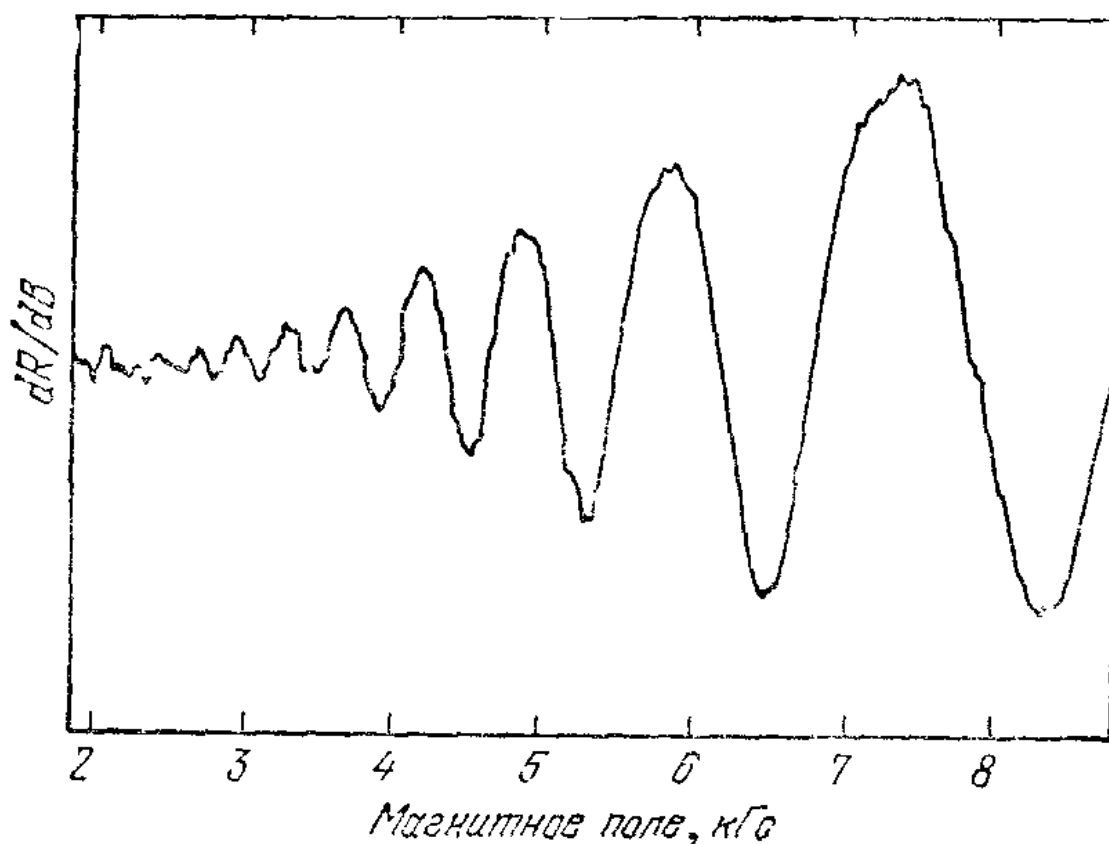


Рисунок 17: Циклотронный резонанс в калии. Частота СВЧ поля 68 ГГц, поле в плоскости (110). По вертикальной оси отложена производная от потерь как функции магнитного поля (измерения осуществлялись в схеме с модуляцией поля). Из книги [10].

Отметим, что если ферми-поверхность устроена сложно, то циклотронная масса окажется разной для разных сечений ферми-поверхности плоскостями, перпендикулярными к магнитному полю. Так как каждой циклотронной массе соответствует свой период вращения по орбите, то на эксперименте будут наиболее весомы состояния в которых много сечений имеет близкие циклотронные массы. Конкретный выбор этих сечений достаточно сложная задача, зависящая от геометрии ферми-поверхности. Такие сечения называют

экстремальными, для не слишком изощрённой геометрии ферми-поверхности они соответствуют сечениям ферми-поверхности плоскостями, перпендикулярными к полю, минимальной и максимальной площади<sup>6</sup>. В наблюдаемой картине периодических максимумов поглощения возникнут биения, описываемые несколькими гармониками.

## Уровни Ландау.

Как уже отмечалось, так как движение по циклотронным орбитам финитно, то в соответствии с общими правилами квантовой физики оно должно квантоваться.

Качественно результат квантования можно получить пользуясь правилом Бора-Зоммерфельда. При движении по циклотронной орбите  $p \cdot 2\pi r = 2\pi m \omega_c r^2 = n h$ . Откуда

радиус квантованной орбиты  $r_n = \sqrt{\frac{n h}{2\pi m \omega_c}} = \sqrt{n \frac{c \hbar}{e B}}$ , а энергия квантованного движения

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{n^2 \hbar^2}{2m r_n^2} = n \hbar \frac{e B}{2m c} = n \frac{\hbar \omega_c}{2}. \text{ Этот ответ даёт представление об эффекте по порядку}$$

величины, но как мы увидим далее отличается от точного в два раза<sup>7</sup>.

Точное решение этой задачи требует решения уравнения Шредингера в магнитном поле. Приведём здесь это решение (оно также есть в курсе теоретической физики и будет более подробно обсуждаться при рассмотрении двумерного электронного газа в магнитном поле).

Будем считать электроны невзаимодействующими, тогда получим простую одночастичную задачу. Воспользуемся тем, что в магнитном поле импульс частицы перенормируется как

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}, \text{ где } \vec{A} \text{ - вектор-потенциал магнитного поля ( } \vec{B} = \text{rot } \vec{A} \text{ ), который для этой}$$

задачи удобно выбрать в виде  $\vec{A} = (0, Bx, 0)$  (поле направлено вдоль Z).

Уравнение Шредингера для свободного электрона имеет вид:

$$\frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x^2 + \left( \hat{p}_y - \frac{e}{c} B \hat{x} \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right) \Psi(x, y, z) = E \Psi(x, y, z).$$

Ищем решение в виде  $\Psi(x, y, z) = e^{ik_y y} e^{ik_z z} \psi(x)$ . Переменная  $z$  сразу отделяется и даёт просто свободное движение вдоль оси  $Z$  с вкладом в энергию  $\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ . Для движения в плоскости подстановкой получаем:

6 Вблизи от этих сечений сечения ферми-поверхности меняются слабо и, следовательно, и циклотронные массы будут сконцентрированы вблизи значений для экстремальных сечений.

7 Более строгое рассмотрение [11] с учётом перенормировки импульса в магнитном поле устраняет это

расхождение. Для перенормированного импульса правило Бора-Зоммерфельда  $\oint \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right) d\vec{l} = n h$ .

Для круговой классической орбиты первое слагаемое будет  $2\pi r_n p_n = 2\pi \omega_c m_c r_n^2$ , как и ранее. Слагаемое с вектор-потенциалом преобразуем, пользуясь тем, что «поток ротора равен циркуляции вектора»,

т. е.  $\oint \frac{e}{c} \vec{A} d\vec{l} = \frac{e}{c} \int \vec{B} d\vec{S} = \frac{e}{c} \pi r_n^2 B = \pi \omega_c m_c r_n^2$ . С учётом знаков получаем  $r_n^2 = \frac{2 n \hbar}{\omega_c m_c}$  и

$$E_n = n \hbar \omega_c.$$

$$\frac{1}{2m} \left( -\hbar^2 \psi'' + \left( \hbar^2 k_y^2 - 2k_y \hbar \frac{e}{c} B x + \frac{e^2}{c^2} B^2 x^2 \right) \psi \right) = W \psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + \frac{e^2 B^2}{2mc^2} \left( x - \frac{\hbar c k_y}{e B} \right)^2 \psi = W \psi$$

Уравнение совпадает с уравнением гармонического осциллятора с положением равновесия в точке  $x_0 = \frac{\hbar c k_y}{e B}$ , называемой положением ведущего центра. «Жёсткость» осциллятора равна  $\kappa = \frac{e^2 B^2}{mc^2}$ , соответственно характерная частота, определяющая квант энергии осциллятора  $\omega_c = \sqrt{\frac{\kappa}{m}} = \frac{e B}{mc} = \frac{m_0}{m} \frac{2\mu_B B}{\hbar}$ , что совпадает с классической циклотронной частотой ( $m_0$  — входящая в магнетон Бора масса свободного электрона).

Энергия  $n$ -ого уровня равна  $W_n = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$ , полная энергия

$$E(n, k_z) = \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Введём магнитную длину  $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{e B}}$ <sup>8</sup>, с учётом этого обозначения  $x_0 = l_B^2 k_y$ . Магнитная длина задаёт характерный масштаб на который электрон удаляется от ведущего центра, она может быть истолкована в квазиклассическом подходе как величина порядка радиуса циклотронной орбиты для первого уровня Ландау. В поле 10 Тл магнитная длина равна  $0.81 \cdot 10^{-6} \text{ см}$ . Магнитный поток, пронизывающий циклотронную орбиту,  $\Phi_0 = \pi l_B^2 B = \frac{\pi \hbar c}{e} = 2.05 \cdot 10^{-7} \text{ Э} \cdot \text{см}^2$  называют квантом потока<sup>9</sup>.

Найденные уровни энергии — это уровни Ландау электронов во внешнем магнитном поле. Заметим, что энергия уровней с различной координатой ведущего центра совпадает,  $Y$ -компонента волнового вектора входит лишь в в координату ведущего центра.

## Осцилляции проводимости и намагниченности.

Отметим, что возникновение характерных значений энергии  $\hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right)$  должно привести к появлению каких-то особенностей в плотности электронных состояний с шагом  $\hbar \omega_c$ . В частности, для двумерной системы электроны могли бы иметь только такие дискретные энергии. Точное вычисление плотности состояний с учётом квантованных уровней Ландау нам сейчас не нужно.

Для металлов всегда выполнено условие  $\varepsilon_F \gg \hbar \omega_c$ , это означает, что для металлов всегда заполнено большое количество уровней Ландау. При изменении поля меняется расстояние

8 С обозначениями  $x_0$  и  $l_B$  уравнение Шредингера принимает вид  $-\psi'' + \frac{(x-x_0)^2}{l_B^4} \psi = w \psi$ , где

$$w = \frac{2mW}{\hbar^2}$$

9 В литературе есть разные традиции обозначения кванта потока. Здесь мы следуем Абрикосову [11], в книге Киттеля [10] используется вдвое большее значение.

между этими уровнями и при выполнении условия  $\varepsilon_F = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)$  очередной уровень Ландау пересекает поверхность Ферми. В силу большого числа заполненных уровней ситуация когда под поверхностью Ферми находится  $n \gg 1$  или  $(n-1) \gg 1$  уровней почти не отличаются — важно только расположение поверхности Ферми относительно ближайшего уровня Ландау. Следовательно, мы можем ожидать возникновения некоторых осциллирующих свойств металла при прохождении очередного уровня Ландау через поверхность Ферми. Необходимым условием для наблюдения таких осцилляций является малость температуры по сравнению с циклотронным расщеплением уровней — для наблюдения осцилляционных эффектов требуется  $T \ll \hbar \omega_c$ . До развития современных методик, таких как APRES, осцилляционные эффекты наряду с циклотронным резонансом были основными методами изучения ферми-поверхностей [10]. Сейчас они используются для изучения свойств экзотических проводников [12] благодаря технической простоте их реализации и возможности помещения образца в условия сверхнизких температур, сильных магнитных полей [13], [14], [15], [16] или высоких давлений [17].

## Эффект Шубникова-де Гааза.

Осцилляции проводимости, связанные с прохождением уровней Ландау через поверхность Ферми называют эффектом Шубникова-де Гааза. Это явление было открыто в 1930 году на висмуте совместно работающими советским физиком Л.В.Шубниковым<sup>10</sup> и голландским физиком В. де Гаазом<sup>11</sup> в Лейдене. Физическая причина очевидна: проводимость металла определяется в том числе и плотностью состояний на ферми-поверхности. Поэтому периодическое изменение плотности состояний при пересечении уровнем Ландау поверхности Ферми будет приводить к осцилляции сопротивления.

Максимумы проводимости наблюдаются при условии совпадения энергии Ферми с очередным экстремумом на зависимости  $D(\varepsilon) : \varepsilon_F = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar \frac{eB}{mc} \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . То есть, экспериментально измеренная зависимость  $\sigma(B)$  должна иметь регулярные равноотстоящие максимумы будучи построенной как функция обратного поля  $\frac{1}{B}$ <sup>12</sup>.

Осцилляции в координатах обратного поля традиционно характеризуют «частотой»

$$F = \frac{\varepsilon_F m c}{\hbar e},$$

измеряемой в единицах напряжённости магнитного поля (тесла). При наличии

нескольких циклотронных масс будет наблюдаться несколько «частот» и «биения» на графике  $\sigma(1/B)$ .

Пример таких данных, измеренных на соединении из класса «тяжёлых фермионов» показан на рисунке 18. Измерения проведены в полях до 20 Тл при температурах до 35 мК. Видно, что на фоне общего (монотонного вплоть до почти максимального поля) роста сопротивления с полем возникают осцилляции сопротивления с амплитудой около 1%. Рост амплитуды осцилляций с полем связан с тем, что с ростом поля растёт расстояние между уровнями

10 Одной из трагических страниц советской науки является то, что Л.В.Шубников был репрессирован в 1937 году и расстрелян, в 1956 году реабилитирован.

11 Wander Johannes de Haas Этот же физик является соавтором эффекта Эйнштейна-де Гааза (наблюдение связи между механическим и магнитным моментом) и эффекта де Гааза-ван Альфена (обсудим далее). Иногда его фамилию пишут в русской транскрипции как де Хааз, оба написания приемлемы.

12 Поле наблюдения очередного максимума проводимости  $B_n^{(max)} \propto \frac{1}{n + \frac{1}{2}} \approx \frac{1}{n} + Q \left( \frac{1}{n^2} \right)$

Ландау и тепловые флуктуации оказывают всё меньший эффект. По той же причине амплитуда осцилляций растёт при понижении температуры. Таким образом, анализ температурной зависимости амплитуды осцилляций (для этого разработана теория Лифшица-Косевича) позволяет извлечь информацию о величине расщепления уровней Ландау — то есть о циклотронной массе. Наблюдаемые осцилляции соответствуют эффективной массе электрона около 13 масс свободного электрона.

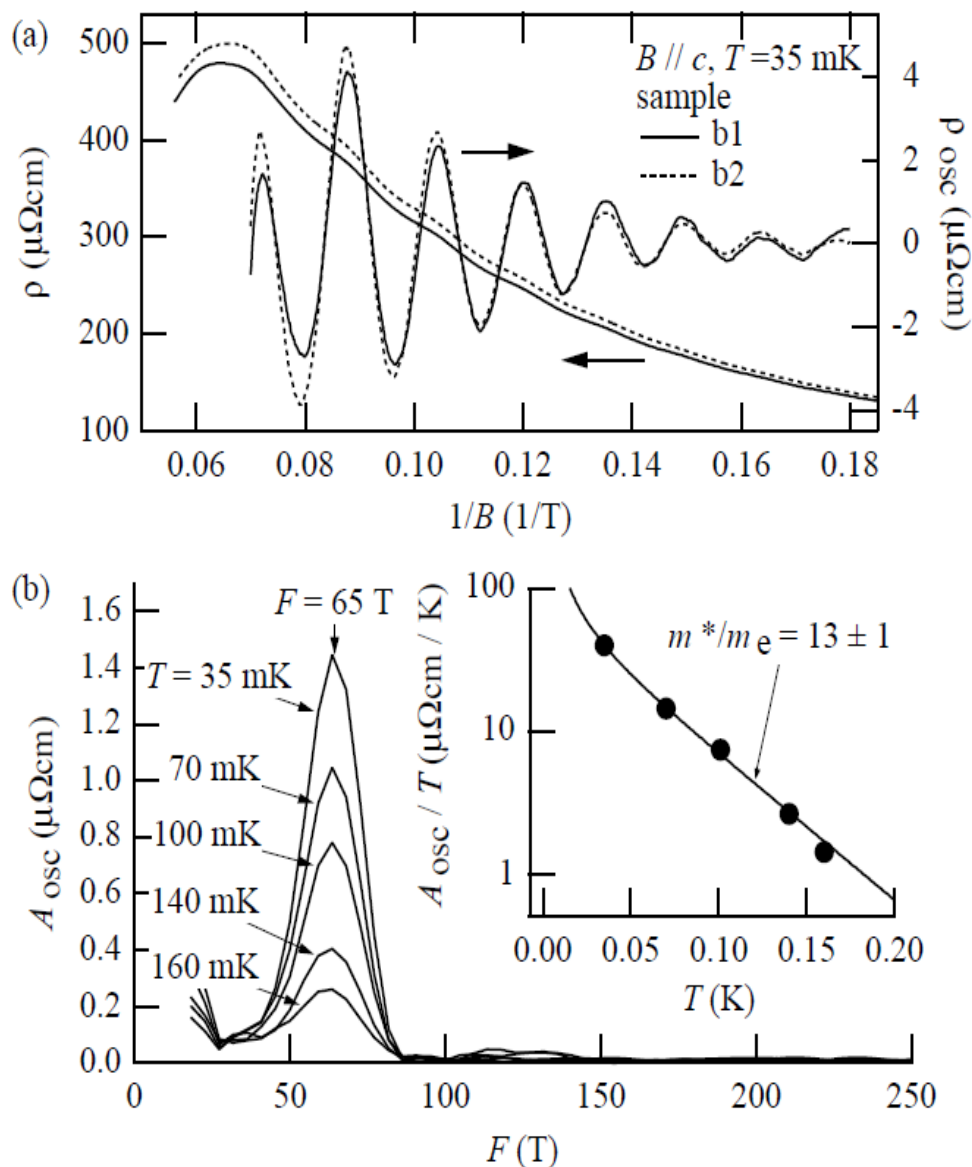


Рисунок 18: Пример наблюдения шубниковских осцилляций сопротивления в тяжелофермионном соединении  $\text{CeNiSn}$ . (a) Сопротивление как функция обратного поля при температуре 35 мК. Представлены данные измерений на двух образцах (сплошная и пунктирная линии). Также показана выделенная на фоне монотонного роста сопротивления в поле осциллирующая часть. (b) Преобразование Фурье от измеренной при разных температурах зависимости сопротивления. На вставке — зависимость амплитуды осцилляций от температуры. Из статьи [12].

Пример наблюдения шубниковских осцилляций в полях до 60 Тл (импульсное магнитное поле в Национальной лаборатории высоких магнитных полей в Талахаси, Флорида, США) и при высоких давлениях более 10000 атмосфер, наблюдаемых в родственных квазидвумерных

металлорганических проводниках показаны на рисунках 19, 20.

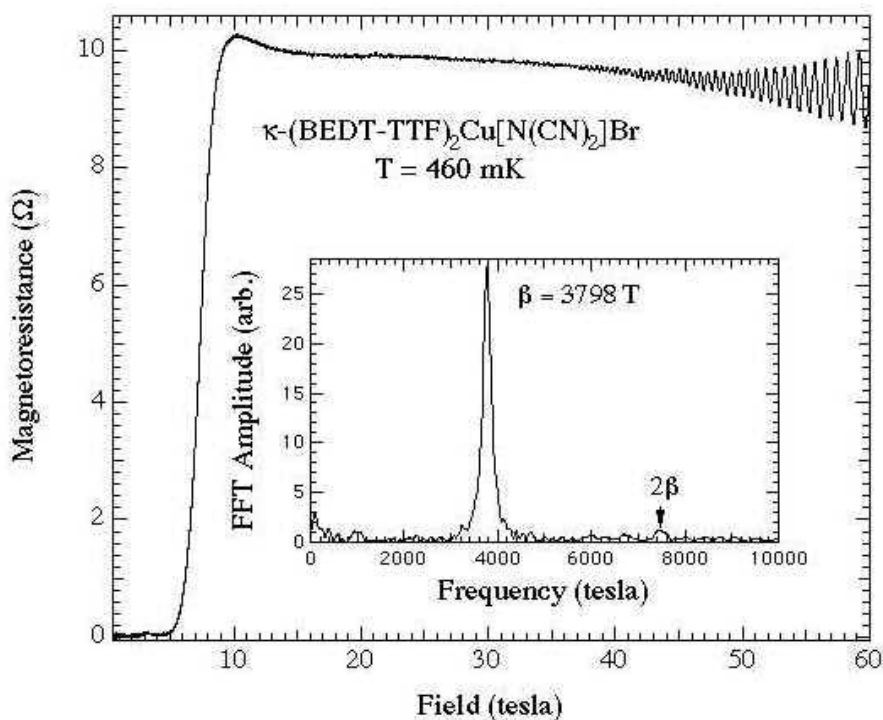


Рисунок 19: Осцилляции сопротивления в квазидвумерном проводнике  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Br в высоких магнитных полях до 60 Тл. На вставке — фурье-преобразование от наблюдаемых осцилляций. С сайта [13].

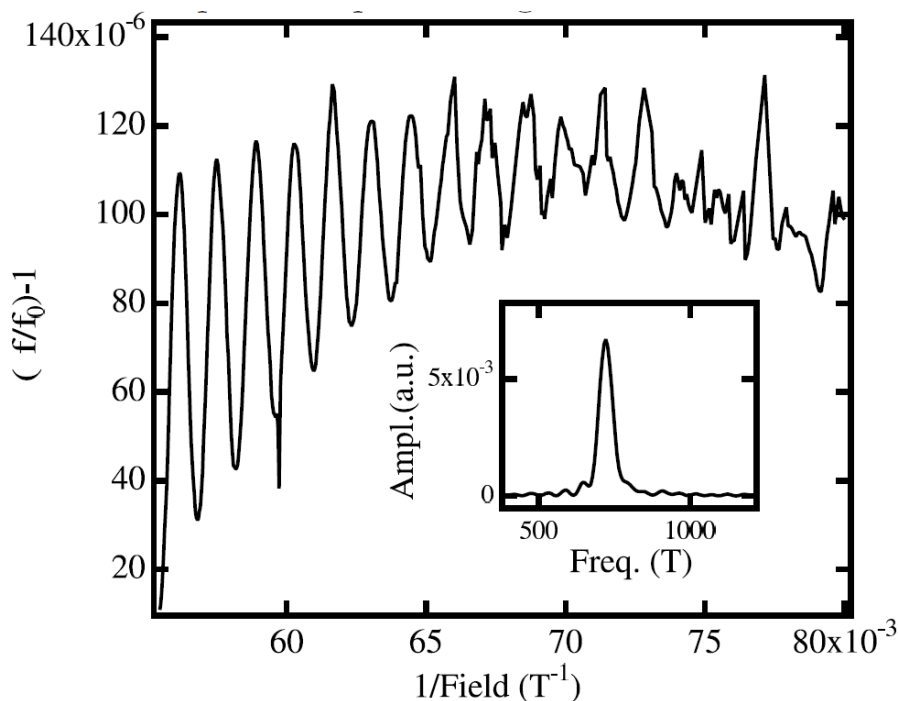


Рисунок 20: Осцилляции сопротивления в  $\kappa$ -(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub>, измеренные при давлении 1.67 кбар и температуре 90 мК в поле до 20 Тл. На вставке — фурье-преобразование осцилляций. Измерения проводились бесконтактным методом по изменению поверхностного высокочастотного импеданса. По вертикальной оси отложена частота высокочастотной колебательной системы. Из работы [17].

## Эффект де Гааза- ван Альфена.

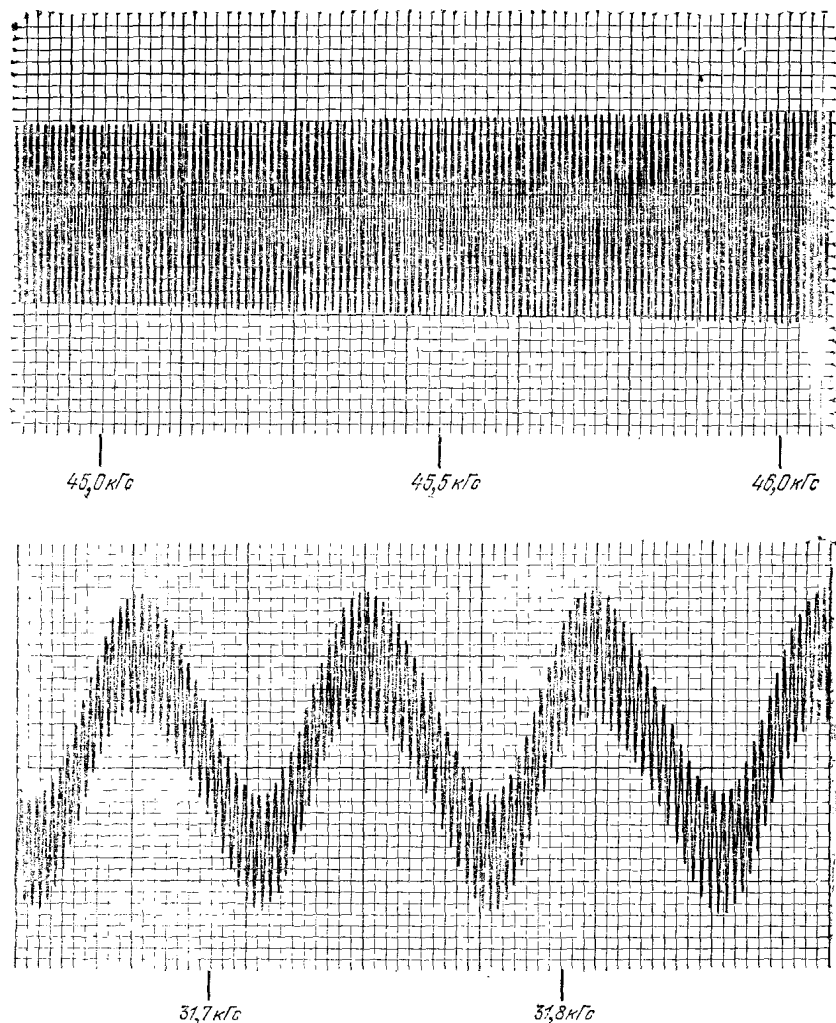


Рисунок 21: Осцилляции де Гааза-ван Альфена в золоте. Измеряется производная от восприимчивости по полю. Сверху:  $B \parallel [110]$  и осцилляции обусловлены движением по одному типу дырочных траекторий (траектория типа «собачья кость» по перетяжкам между ферми-сферами). Снизу:  $B \parallel [111]$  и наблюдается наложение осцилляций с разным периодом от носителей с разной циклотронной массой (осцилляции с малым периодом соответствуют большим сечениям «шара» ферми-поверхности, осцилляции с малым периодом — сечениям перетяжек между ферми-сферами).  $T = 1.2 \text{ K}$  Из книги [10].

Отметим на качественном уровне, что при орбитальном движении электронов по циклотронной орбите каждый электрон создаёт магнитное поле направленное против внешнего. То есть, орбитальное движение по циклотронным орбитам должно приводить к диамагнитному отклику системы электронов. Этот эффект называется диамагнетизмом Ландау.

При низких температурах ( $T \ll \hbar \omega_c$ ) диамагнитный вклад также как и проводимость окажется чувствителен к расположению энергии Ферми относительно уровней Ландау (точные вычисления достаточно громоздки и мы их приводить не будем [11]). Таким образом, из-за квантования движения электронов в магнитном поле мы должны ожидать осцилляций намагниченности металла при изменении магнитного поля.

Для экспериментатора этот метод представляет интерес ввиду даже большей простоты измерения, чем сопротивление — при измерении в экстремальных условиях не надо

подводить к образцу провода. Пример экспериментальной ячейки для измерений в высоких магнитных полях представлен на рисунке 22: образец крепится к гибкой консоли, смещение которой детектируется либо чувствительным тензодатчиком либо по изменению ёмкости конденсатора, одна из пластин которого связана с консолью. При помещении в градиент магнитного поля изгиб консоли оказывается пропорционален намагниченности образца.

Пример исторических измерений осцилляций де Гааза-ван Альфена на золоте представлен на рисунке 21. В эксперименте использовалась модуляция поля для повышения чувствительности, поэтому наблюдаемый сигнал пропорционален производной магнитной восприимчивости<sup>13</sup>. Ферми-поверхность золота состоит из сфер, соединённых перетяжками на границах первой зоны Бриллюэна. Поэтому в различных ориентациях магнитного поля вклад в циклотронную массу дают различные экстремальные сечения ферми-поверхности. В одном из случаев наблюдается наложение двух частот осцилляций (нижняя панель на рисунке 21).

Примеры измерений эффекта де Гааза-ван Альфена в более экзотических системах показаны на рисунках 22, 23. Не вдаваясь в подробности анализа отметим, что этот метод позволяет обнаружить наличие особенностей ферми-поверхности и наличие носителей с различными эффективными массами, определить эффективную (циклотронную) массу носителей и их концентрацию.

---

13 Такая модуляция является стандартной экспериментальной техникой. Если измеряется величина  $A$  как функция некоторого воздействия  $X$ ,  $A(X)$ , то при включении слабой модуляции воздействия  $X(t) = X_0 + x \cos \Omega t$  наблюдаемый сигнал есть  $A(t) = A(X_0 + x \cos \Omega t) = A(X_0) + \left. \frac{dA}{dX} \right|_{X=X_0} \cdot x \cos \Omega t$ . При детектировании только переменной составляющей сигнала (измерения на переменном токе всегда предпочтительнее экспериментально) наблюдается сигнал, пропорциональный производной от измеряемой величины по воздействию (полю).



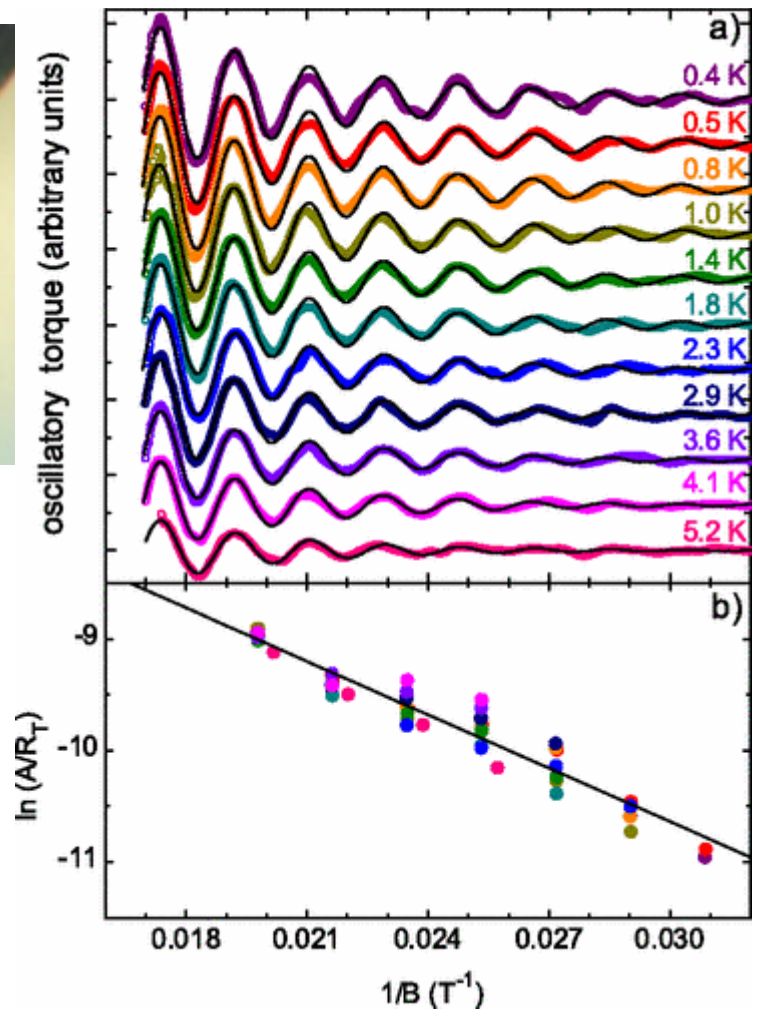
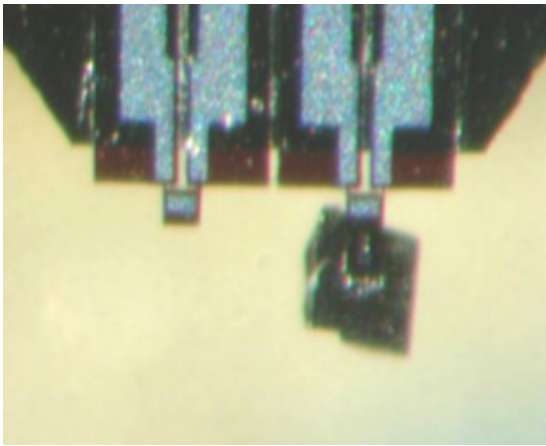


Рисунок 22: Слева: Образец сверхпроводящего купрата  $YBa_2Cu_3O_{6.5}$  на консоли магнетометра, размер образца  $140 \times 140 \times 40$  мкм<sup>3</sup>. Справа: осцилляции намагниченности в поле до 67 Тл и зависимость приведённой амплитуды осцилляций от поля. Чёрные кривые на левой панели — модельный расчёт в теории Лифшица-Косевича. С сайта [14] и из статьи [15].

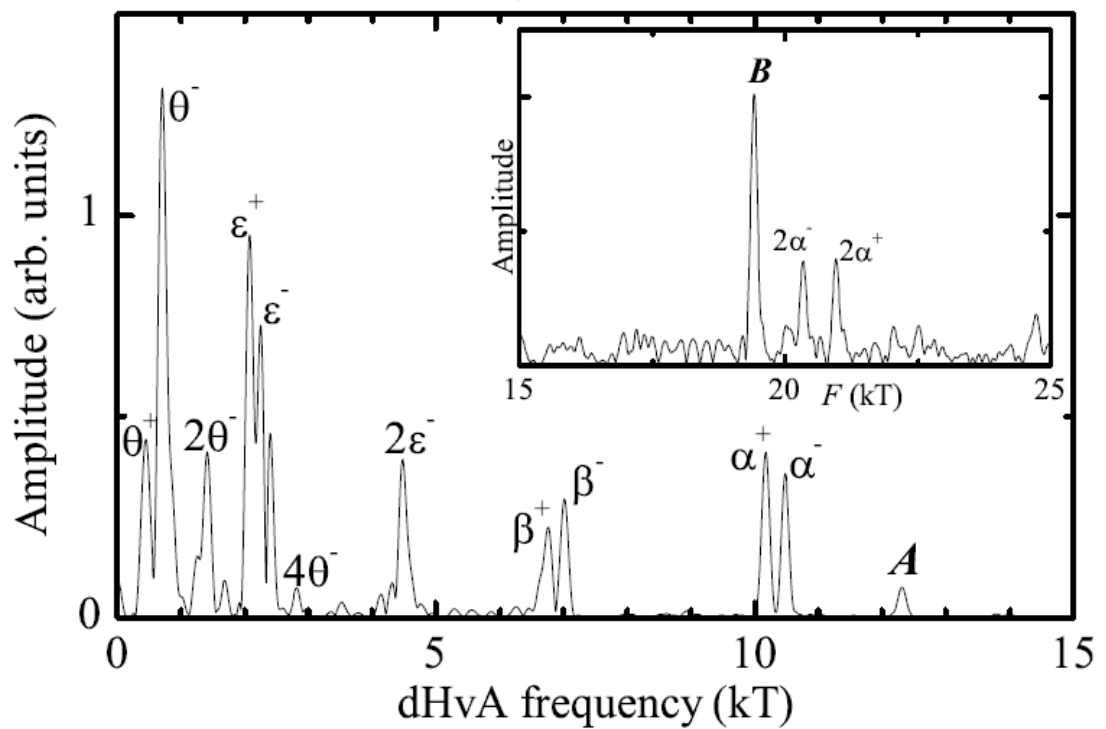
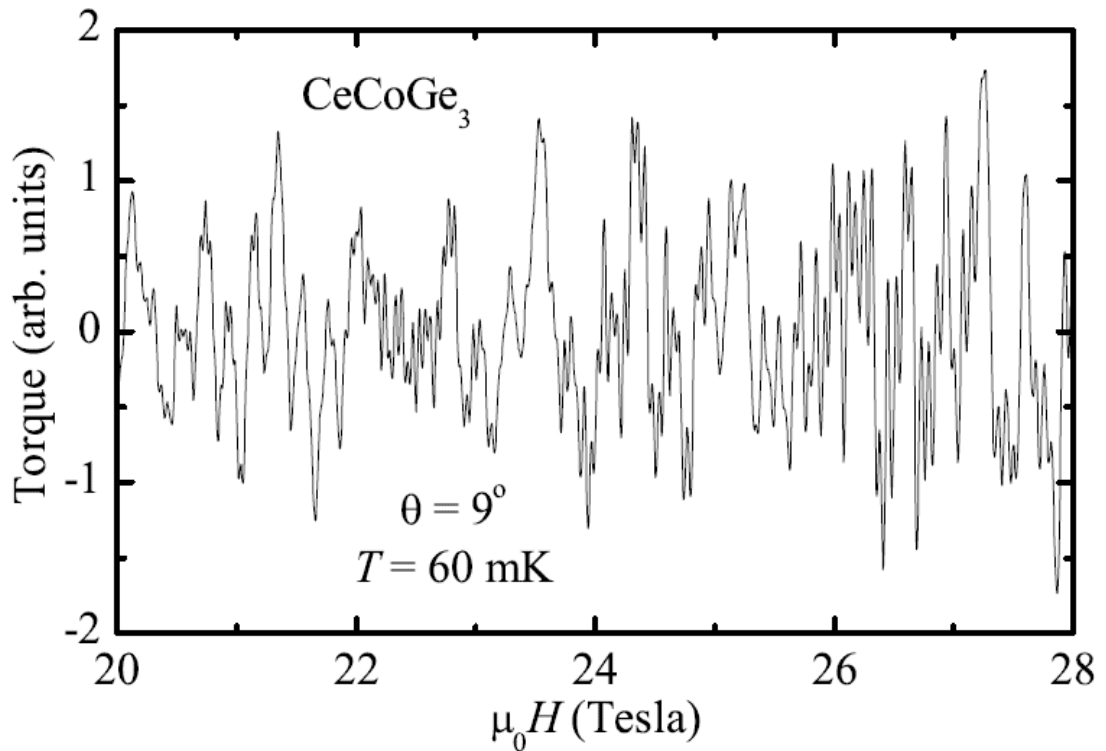


Рисунок 23: Осцилляции намагниченности в тяжелофермионном соединении  $CeCoGe_3$ .  
 Сверху: экспериментальные данные. Снизу: фурье-преобразование экспериментальных  
 данных, показывающее наличие нескольких типов носителей заряда.  $T=60$  мК, поле  
 приложено под углом  $9^\circ$  от оси  $[100]$  к оси  $[110]$ . Из статьи [16].