

Как устроены металлы?

М. КАГАНОВ

Посвящается Илье Михайловичу
Лифшицу

В ЯНВАРЕ 1997 года Илье Михайловичу Лифшицу исполнилось бы 80 лет. Он не дожил до этого возраста, уйдя из жизни в 1982 году. Причина — болезнь сердца. Помнят Илью Михайловича не только близкие ему люди: родственники, друзья, ученики. Он оставил заметный след в науке, которой активно занимался с 18-летнего возраста буквально до последних дней своей жизни.

Академик И. М. Лифшиц был выдающимся ученым — физиком-теоретиком с мировым именем. Его заслуги признавали не только в нашей стране: ему присуждали престижные международные премии и избрали в Национальную академию наук США.

Когда умер Л. Д. Ландау (1968 г.), П. Л. Капица пригласил И. М. Лифшица возглавить отдел Института физических проблем (теперь он носит имя П. Л. Капицы). До этого он работал в Харькове, руководил одним из теоретических отделов УФТИ (Украинского физико-технического института) и кафедрой статистической физики и термодинамики Харьковского университета. Теоретическим отделом Института физических проблем И. М. Лифшиц руководил 14 лет, и все эти годы он не только вел научную работу, но и преподавал, был профессором физического факультета Мос-

ковского университета. Многие активно работающие специалисты по теории твердого тела получили свою специальность под руководством Ильи Михайловича. Все они хорошо помнят своего учителя — замечательного ученого и очень хорошего человека, гордятся своей принадлежностью к Школе Ильи Михайловича Лифшица.

Нетрудно написать биографию ученого. Родился..., учился..., защитил кандидатскую, потом докторскую диссертацию, работал в таких-то научных учреждениях, был избран в такие-то академии наук... Но ведь ученого характеризует его научная деятельность — то, что он сделал. Сделал первым. На что-то открыл глаза людям, что-то объяснил, что-то предсказал. Эти «что-то» раскрыть очень трудно. Ведь ученый (особенно в наши дни) не начинает на пустом месте. Для того чтобы понять сделанное им, надо знать, что было сделано до него. Кроме того, надо уметь понять, как было сделано «что-то», иначе невозможно оценить сделанную работу. А для этого в данном случае надо владеть аппаратом теоретической физики, которым, стоит подчеркнуть, Илья Михайлович владел мастерски.

Похоже, ознакомить с научными

достижениями И. М. Лифшица не физика невозможно. По-настоящему действительно невозможно. Очень это меня огорчает. Всю свою научную жизнь (до 1982 г., конечно) я работал под непосредственным руководством Ильи Михайловича, много с ним разговаривал, учился у него — в самом непосредственном смысле этого слова. Неужели, рассказывая о своем учителе, я должен ограничиться лишь утверждением, что И. М. Лифшиц — замечательный ученый, утверждением, которому читатель должен верить на слово?! Мне хочется хоть чуть-чуть приоткрыть, чем занимался Илья Михайлович и к чему привели эти занятия. Сразу оговорюсь: я выбрал одну из тем его творчества. Тем было много. Так много, что его могли бы обвинить в том, что он разбрасывался. Но в каждой из тем он получил столь существенные результаты, что говорят другое: работы И. М. Лифшица и работы его учеников оказали существенное воздействие на формирование всей теории конденсированного состояния вещества — огромной области современной физики — и перечисляют различные направления, в которых вклад особенно важен. В перечислении заметное место занимает *электронная теория металлов*, т. е. наука,



призванная объяснить свойства металлов. Вот о ней и пойдет речь.¹

Электроны в металле: квазиимпульс и поверхность Ферми

В начале века было понято, что способность металлов проводить ток связана с существованием в них свободных электронов. Откуда они берутся, понять не сложно. При конденсации атомов металла в твердое тело атомы ионизируются: валентные электроны покидают своих «хозяев» и движутся в электрическом поле, создаваемом положительно заряженными ионами. Конечно, если бы не было электронов, ионы не могли бы удержаться на своих местах и разлетелись бы, ведь они отталкиваются друг от друга. Электроны их удерживают от этого — в целом металл нейтрален. Неплохой образ: ионная кристаллическая решетка, погруженная в электронный газ, состоящий из бывших валентных электронов.

«С точки зрения» ионов, газ не плотен: на каждый ион приходится столько электронов, сколько было у атома металла валентных электронов (пусть их z ; $z = 1, 2, 3, \dots$). Но с нашей (человеческой) точки зрения, газ очень плотен. Размер ячейки кристалла

$$v = a^3 \approx (3 \cdot 10^{-10})^3 \text{ м}^3 \approx 27 \cdot 10^{-30} \text{ м}^3. \quad (1)$$

Для простоты мы считаем ячейку кристалла кубиком со стороной $a = 3 \text{ \AA}$. Таков правильный, известный из экспериментов и подтверждаемый теорией, размер ячейки кристаллов многих металлов. Приближенно, конечно. В действительности размеры кристаллических ячеек большинства металлов известны с большой точностью. Плотность электронного газа (число электронов в единице объема) равна

$$n = \frac{z}{a^3} \approx \frac{z}{27} 10^{30} \text{ м}^{-3}. \quad (2)$$

Для сравнения: плотность воздуха $n_{\text{возд}} \sim 2 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$. Отличие от реального газа (того же воздуха) еще в том, что электрон в 3600 раз легче молекулы самого легкого газа из состава воздуха — водорода. Масса электрона $m \approx 10^{-30} \text{ кг}$.

¹Интересный и живой рассказ о работе семинара по физике полимеров, которым руководил И.М.Лифшиц, об особенностях творческого метода Ильи Михайловича можно найти в статье А.Гросберга и М.Каганова «Вокруг шарика» в «Кванте» №2 за 1996 год. (Прим.ред.)

Итак, свободные электроны в металле — очень плотный газ очень легких частиц. К чему я веду? Сейчас станет ясным. Появится несколько странное словосочетание — *квантовый газ*. Появится, но через несколько строк.

Электронную теорию металлов на основе представления о свободных электронах, как уже упоминалось, пытались создать еще в начале века. Основы этой теории заложил великий голландский физик Хендрик Антон Лоренц (1853–1928). Вы, думаю, знаете это имя. (Преобразования, используемые в теории относительности Эйнштейна, называют преобразованиями Лоренца. Но здесь речь идет не о них.) Лоренцу удалось многие свойства металлов неплохо объяснить, исходя из предположения, что в металлах есть *газ электронов*. Свойства газов в те годы были хорошо известны. Эти знания использовал Лоренц для объяснения свойств металлов. И в каком-то смысле это ему удалось. Правда, оставались странные недоразумения: свободные электроны (мы в дальнейшем их будем называть электронами проводимости — по их главной функции), объяснившие электропроводность и даже такое непростое свойство как термоэлектричество, не обнаруживали себя в тепловых свойствах металла. Классическая физика утверждает, что существует закон равномерного распределения: в среднем на каждую степень свободы приходится $1/2 kT$ энергии ($k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ — постоянная Больцмана, T — температура в абсолютных градусах). Если в 1 м^3 металла содержится n электронов проводимости (см. формулу (2)), то плотность внутренней энергии металла должна быть на $3/2 nkT$ больше плотности энергии диэлектрика (изолятора), в котором нет свободных электронов. Есть надежные методы измерения внутренней энергии, но почему-то электроны проводимости себя не обнаруживают — внутренние энергии диэлектриков и металлов практически не отличаются. Правда, измерения производились при обычных (комнатных) температурах.² С этой трудностью сравнительно легко справились, когда было понято, что не только электроны в атоме, но и свободные электроны — газ электронов проводимости — надо описывать, используя квантовые представления. «Всегда?» — может спросить нетерпеливый читатель. Конечно, нет! Тог-

да, когда условия жизни электрона, как члена коллектива (в классическом газе), вступают в противоречие с положениями квантовой физики.

Наверное, все знают, что одна из фундаментальных черт квантово-механического описания движения частиц — соотношение неопределенностей

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar, \quad (3)$$

где Δp — неопределенность импульса, Δx — неопределенность координаты, а $\hbar \sim 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ — знаменитая постоянная Планка (без нее не обходится ни одна квантово-механическая формула). В газе, где в 1 м^3 содержится n частиц, на каждую частицу приходится объем $\sim 1/n$, т.е. $\Delta x \sim n^{-1/3}$. Следовательно, $\Delta p \geq \hbar n^{1/3}$. Для применимости классического описания необходимо, чтобы импульс электрона p был велик по сравнению с его неопределенностью Δp ($p \gg \Delta p$). Согласно закону равнораспределения, в газе средний импульс $p \sim \sqrt{mkT}$. Следовательно, газ можно считать классическим, если

$$T > \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{km} \equiv T_{\text{кв}}. \quad (4)$$

Множители типа $1/2$ опущены, при оценках это допустимо. Подставив в последнюю формулу числа, с удивлением обнаружим, что комнатная температура значительно ниже квантовой: $T_{\text{кв}} \sim 10^5 \text{ К}$. Иначе говоря, практически всегда любой металлический образец содержит *квантовый газ*. Как проявляются квантовые свойства электронов в свойствах газа электронов проводимости? Посмотрите на рисунок 1. На нем схематически показано распределение по энергиям электронов классического (а) и квантового (б) газов. Можно сказать и иначе: на рисунке а приведено распределение частиц по энергиям при $T \gg T_{\text{кв}}$, а на рисунке б — при $T = 0$ и при $T \ll T_{\text{кв}}$. (Причина различия — в принципе запрета Паули, запрещающем более чем одному электрону находиться в одном и том же состоянии. Мы ограничиваемся толь-

²О внутренней энергии судят по измерению теплоемкости. При комнатных температурах ($T \sim 300 \text{ К}$) все твердые тела имеют молярную теплоемкость, равную $3R$, где R — универсальная газовая постоянная (закон Дюлонга и Пти). Если бы электроны проводимости проявляли себя как свободные, то теплоемкость металла (например, Na) должна была бы превысить теплоемкость диэлектриков в 1,5 раза. Не заметить такое отличие невозможно.

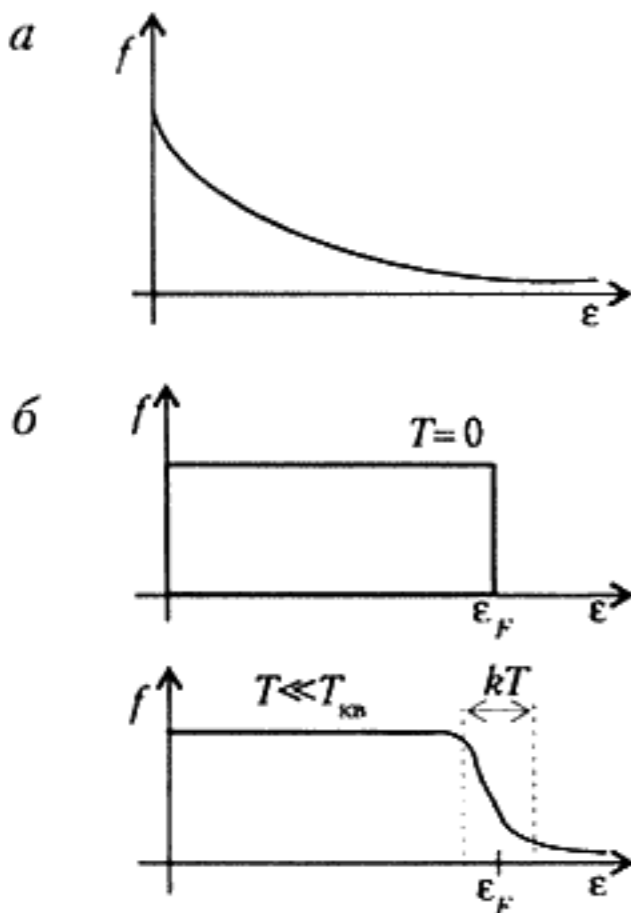


Рис. 1. Классическая и квантовая функции распределения электронов по энергиям: а) функция распределения Максвелла-Больцмана, б) функция распределения Ферми-Дирака (при $T = 0$ и $T \ll T_{кв}$)

ко упоминанием: невозможно все объяснить в одной статье.)

Квантовое распределение частиц по энергиям при $T = 0$ получило название *фермиевской ступеньки*, а энергию ϵ_F , ниже которой все состояния заняты, а выше которой свободны, называют энергией Ферми. Точный расчет показывает, что

$$\epsilon_F = \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m}. \quad (5)$$

Видно, что по порядку величины $\epsilon_F \approx kT$. Можно использовать более наглядное геометрическое представление τ при $T = 0$ заняты все состояния внутри Ферми-сферы (рис. 2) с радиусом

$$p_F = \sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2} = \sqrt{2m\epsilon_F}. \quad (6)$$

В тепловом движении при $T \neq 0$ принимают участие только те электроны, у которых энергия порядка ϵ_F . Их мало: $\sim n \cdot \frac{T}{T_{кв}}$ — значительно

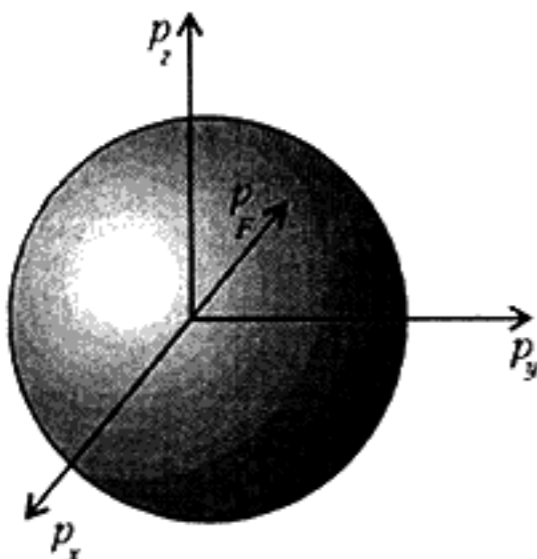


Рис. 2. При $T = 0$ заполнена электронами сфера радиусом $p_F = \sqrt{2m\epsilon_F}$

меньше, чем всех свободных электронов. Поэтому-то они и не обнаруживают себя в тепловых свойствах. И в проводимости металла, как оказывается, принимают участие только те электроны, энергия которых равна ϵ_F (говорят, что они «расположены» на Ферми-сфере). Можно вывести формулу для удельной электропроводности металла

$$\sigma = \frac{S_F e^2 l}{12\pi^3 \hbar^3}, \quad (7)$$

где $S_F = 4\pi p_F^2$, т.е. площадь Ферми-сферы, а l — длина свободного пробега электрона проводимости, т.е. среднее расстояние между двумя столкновениями электрона. В длине пробега l «спрятаны» все механизмы, ограничивающие свободу электрона и объясняющие природу сопротивления (удельное сопротивление $\rho = 1/\sigma$).

Используя представление о квантовом газе электронов проводимости, строилась электронная теория металлов. Конечно, при этом невозможно было ограничиться квантовым описанием лишь электронов. Например, необходимо было пересмотреть описание колебаний ионов кристаллической решетки. В результате в теории твердого тела и, в частности, в электронной теории металлов появились *фононы*. На этом этапе развития электронной теории металлов, естественно, оставались белые пятна, постепенно заполнявшиеся. Очень большую уверенность в правильности представлений о природе металлического состояния принесло понимание природы сверхпроводимости (Дж. Бардин, Л. Купер, Дж. Шриффер, 1957 г.).

Если просмотреть старые учебники и монографии по электронной теории металлов, то видно, что, выделяя металлы из других твердых тел, авторы объясняли свойства металла вообще, а не конкретно меди, свинца или лития. Действительно, у всех металлов много общих свойств. Похожи тепловые свойства, похоже ведет себя сопротивление с изменением температуры. Примеров можно привести много. Но постепенно накапливались экспериментальные данные, которые с очевидностью показывали: разные металлы ведут себя по-разному в одинаковых условиях. Особенно резко свойства металлов отличаются при низких температурах, близких к абсолютному нулю, и в

сравнительно сильном магнитном поле. На рисунке 3 приведены примеры, демонстрирующие эти отличия.

В чем причина различия свойств разных металлов? Конечно, причин много, но несомненно среди них есть главная. И главная — в виде *поверхности Ферми*. Электрон, оторвавшийся от «своего» атома в кристалле, движется в *периодическом* поле сил ионов. Как было показано (Ф. Блох, Л. Бриллюэн, 1928 г.), квантовое движение электрона в периодическом поле сил очень напоминает движение электрона в пустом пространстве. Состояние движения электрона можно характеризовать вектором, очень похожим на импульс, его называют *квазиимпульсом*³. Он «превращается» в импульс, если периодическую силу устремить к нулю. Мы его по-прежнему будем обозначать буквой \vec{p} (как импульс). Энергия электрона — функция квазиимпульса \vec{p} . И можно говорить о *пространстве квазиимпульсов* (как мы уже говорили об импульсном пространстве, см. рисунок 2 и формулу (6)). Важный факт: пространство квазиимпульсов периодически, причем если кристаллическая ячейка — кубик с ребрами, равными a , то ячейка пространства квазиимпульсов — кубик с ребрами, равными $\frac{2\pi\hbar}{a}$. Как бы опуская постоянную Планка \hbar , пространство квазиимпульсов часто называют *обратным пространством*.

Зависимость энергии от квазиимпульсов можно изображать в виде изоэнергетических поверхностей (поверхностей равной энергии). Энергия — периодическая функция квазиимпульса. Поэтому для изображения изоэнергетической поверхности можно ограничиться одной ячейкой обратного пространства, а можно рисовать ее во всем пространстве (его тогда называют расширенным, ведь одной ячейки достаточно).

Среди изоэнергетических поверхностей есть одна — выделенная. Это — поверхность Ферми. Она соответствует энергии Ферми $\epsilon = \epsilon_F$:

$$\epsilon(\vec{p}) = \epsilon_F. \quad (8)$$

³ Когда частица движется под действием периодической силы, то, хотя обычный импульс не сохраняется, существует сохраняющийся вектор — квазиимпульс. Именно потому, что он сохраняется (как энергия), он может служить для характеристики движения.

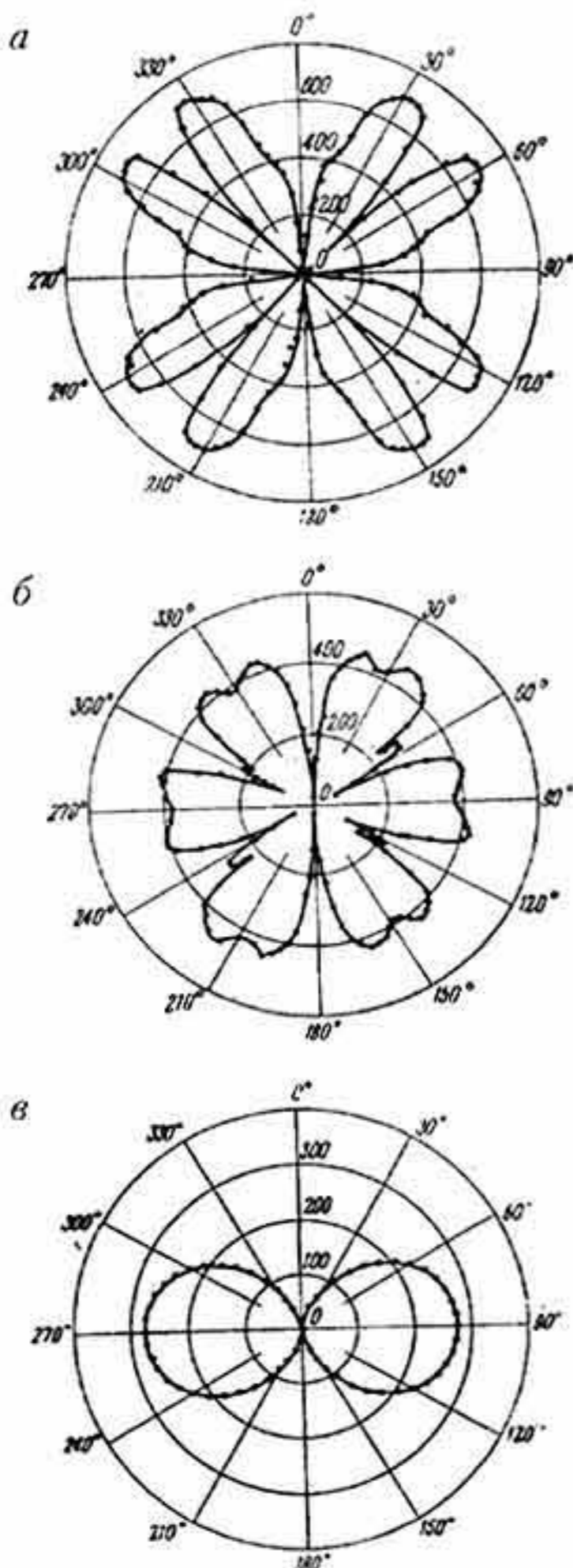


Рис.3. Изменение сопротивления металла — олова, свинца и таллия соответственно — при помещении его в магнитное поле, (в зависимости от угла между кристаллическими осями и магнитным полем)

Именно на ней и вокруг этой поверхности находятся электроны, играющие важную роль в свойствах металлов.

Металлы отличаются друг от друга тем, что у них разные поверхности Ферми

Прежде чем познакомиться с тем, как узнали, каковы поверхности Ферми разных металлов, и какую роль в процессе понимания устройства металлов сыграли работы Ильи Михайловича Лифшица и его учеников, посмотрите на таблицу. В ней собраны сведения о том, чем похожи и чем отличаются электроны в свободном

от сил пространстве и в периодическом поле сил ионов кристаллической решетки.

Проблема «устройства» макроскопических, в частности твердых, тел интересовала И.М.Лифшица с самого начала его научной деятельности. Интересы его в большой мере сосредотачивались на решении «обратных» задач. Он неоднократно задумывал-

му рассеянию нейтронов кристаллами.⁴ Однако этот метод принципиально не применим для исследования характера движения электронов металла. К счастью, в случае электронов есть важное облегчающее обстоятельство: нас интересуют не все электроны, а лишь те, энергия которых равна энергии Ферми или близка ей. А это значит, что мы должны уметь

| Электрон | |
|--|--|
| в свободном пространстве | в кристалле |
| состояние характеризуется | |
| импульсом (\vec{p}) | квазиимпульсом (\vec{p}) |
| энергия (ϵ) | |
| $\epsilon = p^2 / (2m)$ | $\epsilon = \epsilon(\vec{p})$ — периодическая функция квазиимпульса |
| скорость (\vec{v}) | |
| $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$ | $\vec{v} = \frac{d\epsilon(\vec{p})}{d\vec{p}} \neq \frac{\vec{p}}{m}$ |
| уравнения движения | |
| изменение импульса в единицу времени равно силе \vec{F} (закон Ньютона) $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}$, $\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = \frac{1}{m}\vec{F}$ | изменение квазиимпульса в единицу времени равно внешней силе F^{ext} (в F^{ext} не входит периодическая сила ионов кристалла) $\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}^{ext}$, $\frac{d^2x_i}{dt^2} = \sum_{k=1}^3 \left(\frac{1}{m^*}\right)_{ik} F_k^{ext}$, где $\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ik} = \frac{\partial^2 \epsilon(\vec{p})}{\partial p_i \partial p_k}$ |
| законы сохранения энергии и импульса (квазиимпульса) двух электронов | |
| $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2$ | $\epsilon_1 + \epsilon_2 = \epsilon'_1 + \epsilon'_2$ $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2 + \vec{K}$, где \vec{K} — один из периодов пространства квазиимпульсов |

ся, нельзя ли по экспериментальным данным выяснить, как движутся атомы и электроны в твердом теле. У него есть небольшая заметка «О колебаниях релятивистских частиц в сильных полях». Она опубликована в Докладах Академии наук СССР в 1948 году. (Заметки в Докладах содержат не более четырех страниц.) В заметке выясняется, как по зависимости периода колебаний частицы от энергии определить профиль потенциальной ямы, в которой частица совершает периодическое движение. Похоже, это — предтеча работ с решением «обратных» задач. А в 1954 году Илья Михайлович сформулировал алгоритм, позволяющий по тепловым свойствам твердых тел получить сравнительно подробную характеристику колебательного энергетического спектра твердых тел. Его метод существенно дополняет широко применяемый метод определения колебательного спектра по неупруго-

определять форму поверхности Ферми (см. (8)) и скорости электронов, имеющих фермиевскую энергию. Как обратил внимание Илья Михайлович, на помощь приходят свойства металлов в магнитном поле при низких температурах.

После первых работ (одну из них я постараюсь схематически изложить) возникло направление в исследованиях металлов, ориентированное на изучение поверхностей Ферми. Все они построены по такому принципу: если поверхность Ферми обладает таким-то свойством, то наблюдается такое-то явление. По идее, должны использоваться подобные работы «в обратном порядке»: наблюдается такое-то явление, значит, поверхность

⁴ Пролетая через кристалл, нейтрон может «качнуть» атомы кристалла. При этом теряет немного энергии и изменяет направление движения. По этим данным определяют, как «качаются» — колеблются атомы кристалла.

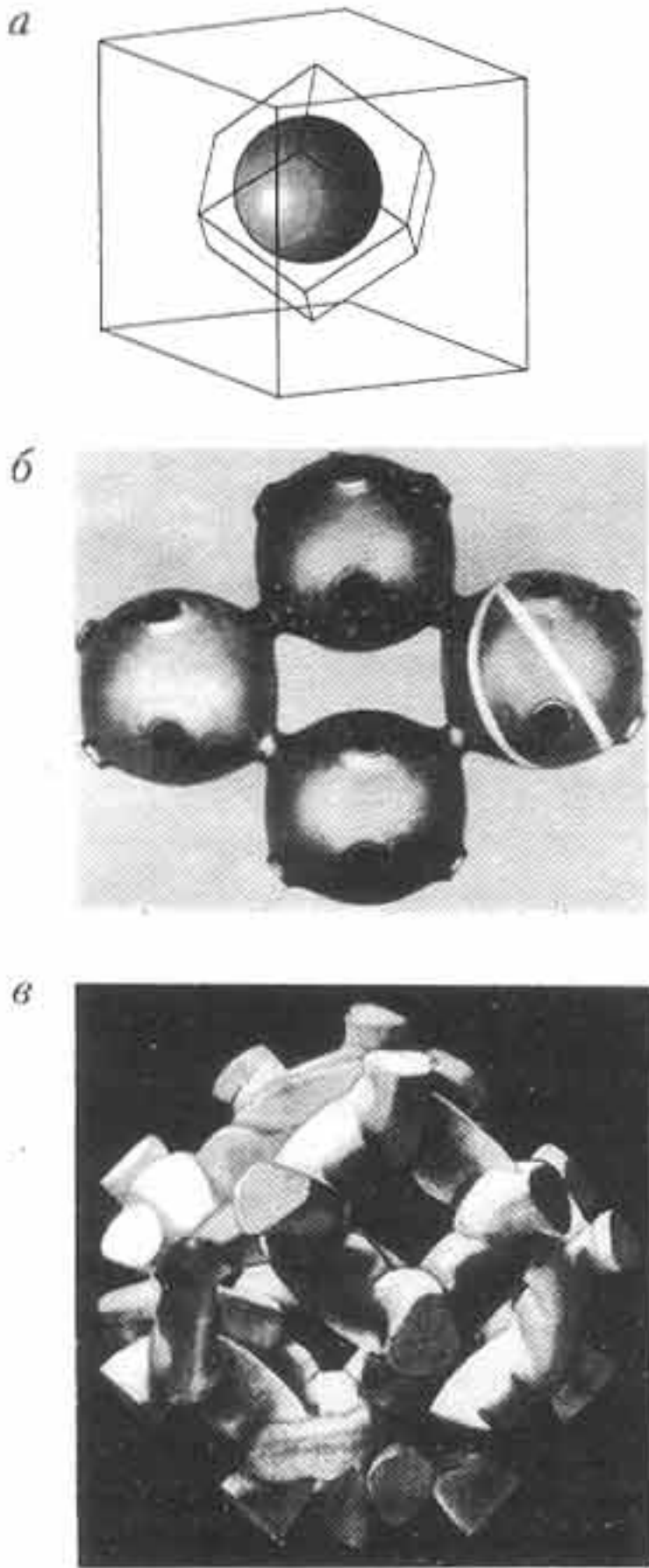


Рис.4. Поверхности Ферми: а) щелочных металлов (близки к сферам), б) золота, в) свинца

Ферми обладает таким-то свойством. На научном сленге этот подход именовался *спектроскопическими возможностями метода*. Многолетние исследования многих физиков в разных странах привели к тому, что поверхности Ферми практически всех металлов известны. На рисунке 4 приведены примеры поверхностей Ферми. Обратите внимание, сколь они непросты. Только металлы первой группы таблицы Менделеева (ее левой половины) имеют поверхности Ферми, близкие к сферам — поверхностям Ферми свободных электронов. Да и у них не все так просто: масса электрона m^* (ее вычисляют по отношению p_F/v_F , где p_F — радиус Ферми-сферы, а v_F — скорость фермиевских электронов) отличается от массы электрона в пустом пространстве (например, у лития $m^* = 2,3m_e$).
Определение поверхностей Ферми

не всегда, естественно, шло по такой прямолинейной схеме: экспериментальное свойство \rightarrow форма поверхности. Привлекались появившиеся во второй половине XX века расчетные методы — вычисление зависимости энергии электрона от квазиимпульса с использованием более или менее адекватной модели взаимодействия электронов с ионами и друг с другом. Усовершенствование расчетных методов в результате появления все более «умных» ЭВМ позволяло (и позволяет) использовать все более адекватные модели.

Как построить поверхность Ферми?⁵

Теперь (почти в заключение) — обещанный рассказ о том, как свойства металла в магнитном поле помогают «построить» поверхность Ферми. Очень важно для дальнейшего понять следующее: сходство между электроном в кристалле и электроном в пустом пространстве столь велико (см. таблицу), что позволяет *квазиимпульс считать настоящим импульсом*. Это очень четко понимал И.М.Лифшиц и обращался с электроном в кристалле, как с «обычным» электроном. Только энергия такого электрона — периодическая функция импульса. И все. Это дает возможность строить механику такой частицы по хорошо известным правилам. Например, в магнитном поле \vec{B} на электрон, движущийся со скоростью \vec{v} , действует сила Лоренца

$$\vec{F}_L = e[\vec{v} \vec{B}].$$

Знак $[\]$ означает *векторное произведение*: $[\vec{a} \vec{b}]$ — вектор, ортогональный векторам \vec{a} и \vec{b} и равный по величине $ab \sin \theta_{ab}$, где θ_{ab} — угол между векторами \vec{a} и \vec{b} . Так вот, отличие силы Лоренца в случае электрона в кристалле от силы Лоренца в пустом пространстве только в том, что $\vec{v} \neq \vec{p}/m$, а $\vec{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{p}}$ (см. таблицу). Следовательно, движение электрона в металле, помещенном в маг-

⁵ В этой части статьи рассказывается о некоторых оригинальных результатах И.М.Лифшица. Она более трудна для восприятия, но если вы затратите необходимые усилия и разберетесь в основных идеях, то будете вознаграждены: идеи очень глубокие и красивые!

нитное поле, описывается следующими уравнениями:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = e[\vec{v} \vec{B}], \quad \vec{v} = \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{p}}, \quad (9a)$$

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{v}. \quad (96)$$

Из этих уравнений следует ряд фактов.

При движении электрона в магнитном поле сохраняются его энергия ϵ и проекция импульса на магнитное поле p_B . Следовательно, траектория электрона в пространстве импульсов есть плоская кривая, получаемая пересечением поверхности $\epsilon(\vec{p}) = \text{const}$

плоскостью $p_B = \text{const}$. В координатном пространстве проекция траектории на плоскость, перпендикулярную магнитному полю \vec{B} , получается из траектории в пространстве импульсов поворотом на 90° и изменением масштаба с помощью множителя $\frac{1}{|e|B}$ (рис.5).⁶

Рассказывая о движении электрона проводимости в магнитном поле и дойдя до этого места, я понял, что придется часть вычислений пропустить: они требуют более серьезной математической подготовки от читателя, чем та, которой, как принято считать, читатель «Кванта» обладает. Приведу результат. Период обращения электрона проводимости по замкнутой траектории в магнитном поле равен

$$T_B = \frac{2\pi m^*}{|e|B}, \quad m^* = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S(\epsilon, p_B)}{\partial \epsilon}. \quad (10)$$

Здесь $S = S(\epsilon, p_B)$ — площадь, описанная траекторией в пространстве импульсов. Величина m^* имеет размерность массы и называется *эффективной массой в магнитном поле*. Думаю, выражение для m^* может удивить. Но посмотрим, как выглядит эта формула для электрона вне кристалла, у которого $\epsilon = p^2/(2m)$ и, следовательно, $p_\perp^2 = 2m\epsilon - p_B^2$, $S(\epsilon, p_B) = \pi(2m\epsilon - p_B^2)$. Отсюда и из

⁶ Для доказательства того, что ϵ и p_B — постоянные, достаточно умножить уравнение движения (9a) на \vec{v} (получим $\epsilon = \text{const}$) и взять его проекцию на \vec{B} (получим $p_B = \text{const}$). Подобие траекторий — следствие ортогональности $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$ и $\frac{d\vec{p}}{dt}$. Такая ортогональность в каждый момент времени возможна, если траектории подобны и повернуты на 90° друг относительно друга (скорости направлены по касательным к траекториям).

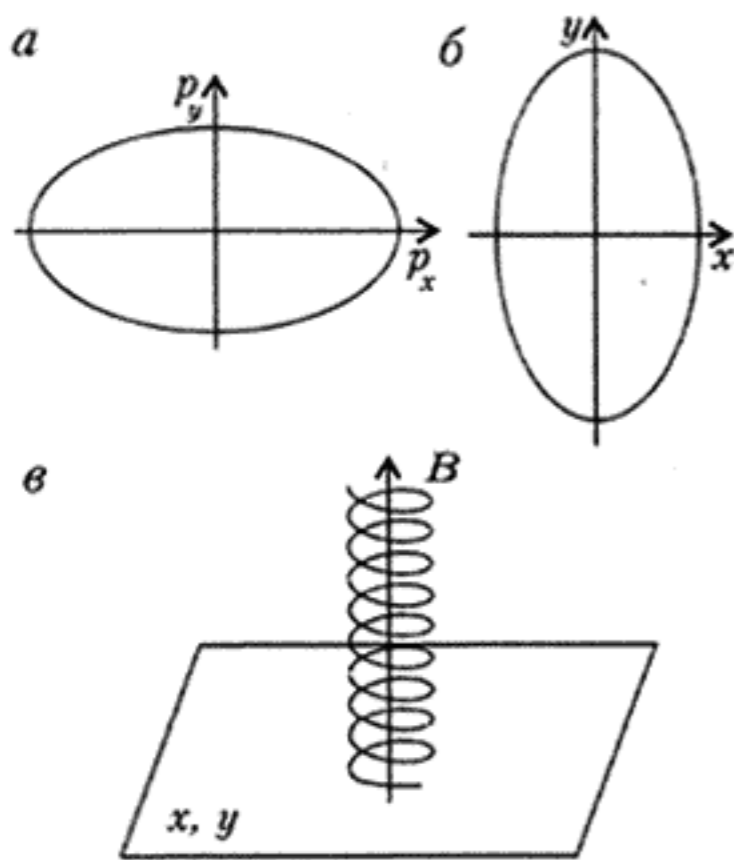


Рис.5. Траектория электрона: а) в пространстве импульсов, б) в координатном пространстве (точнее — проекция траектории на плоскость, перпендикулярную магнитному полю). На самом деле электрон движется по спирали (в)

определения m^* имеем $m^* = m$ (1) — выражение для эффективной массы прошло проверку предельным переходом.

Может (и должен) возникнуть естественный вопрос: почему мы не учитываем квантования движения электрона по замкнутой орбите? Должны учитывать. Но если длина траектории значительно превышает длину волны де Бройля электрона \hbar/p_F , то расстояния между дискретными квантованными уровнями энергии малы и пренебрежение квантованием с большой точностью оправдано.

Многие свойства металлов исследованы на основании классического приближения, т.е. по существу на основании тех формул, которые мы здесь выписали. Законность такого подхода подтверждается оценкой. Для простоты проведем ее, считая, что траектория — окружность. Ее радиус равен $\frac{p_F}{eB}$, и условие, разрешающее использовать классическую (а не квантовую) механику, можно записать так:

$$\frac{p_F}{eB} \gg \frac{\hbar}{p_F}. \quad (11)$$

Но $p_F^2/m \sim \epsilon_F$, а $e\hbar/m = \mu$ — магнитный момент электрона. Электрон имеет не только заряд, но и обладает магнитным моментом, т.е. создает вокруг себя не только электрическое, но и магнитное поле. (Величина магнитного момента электрона $\mu \sim 10^{-23}$ Дж/Тл. Это — очень маленький магнитный момент (маг-

нитный момент 1 см^3 обычного магнита приблизительно в 10^{21} раз больше), но это ведь магнитный момент одного электрона.) Тогда условие (11) переписывается в виде

$$\mu B \ll \epsilon_F. \quad (12)$$

А так как $\epsilon_F \sim 10^{-19}$ Дж, то это означает, что $B \ll 10^4$ Тл. При всех применяемых в физических экспериментах магнитных полях условия (11), (12) выполнены.

Но для того, о чем речь пойдет ниже, необходимо учесть именно квантование движения электрона в магнитном поле. Для этого мы воспользуемся формулой, постулированной Нильсом Бором, когда он пытался объяснить структуру спектра атомов:

$$\epsilon_{n+1} - \epsilon_n = \hbar\omega,$$

$$n - \text{целые числа} \gg 1, \quad (13)$$

где $\omega = \frac{2\pi}{T_B}$ — круговая частота классического движения. Когда была создана логически непротиворечивая квантовая механика (Э.Шрёдингер, В.Гейзенберг), условие (13) было строго получено в той главе квантовой механики, которая была названа *квазиклассическое приближение*.

Итак, из (13) и (10) следует ($\Delta\epsilon = \epsilon_{n+1} - \epsilon_n$):

$$\Delta\epsilon \frac{\partial S}{\partial \epsilon} = \frac{|e|B\hbar}{m^*} \cdot 2\pi m^* = 2\pi\hbar|e|B,$$

$$\text{или } \Delta S = 2\pi\hbar|e|B,$$

а

$$S(\epsilon, p_B) = 2\pi\hbar|e|B \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

$$n - \text{целые числа} \gg 1. \quad (14)$$

Мы воспользовались тем, что $\Delta\epsilon$ при $n \gg 1$ значительно меньше ϵ , а $1/2$ приписали, чтобы результат точнее согласовался с более строгой теорией (ее мы упомянули). Условие квантования площадей (14) впервые было выведено Ильей Михайловичем Лифшицем в 1950 году и носит его имя.⁷ Формуле (14) можно придать другой вид, если от траектории в импульсном пространстве перейти к проекции траектории в координатном пространстве на плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Площадь S_r , которую окружает про-

⁷ Часто говорят «условие Лифшица — Онсагера». Л.Онсагер (1903–1976, Нобелевская премия по химии 1968 г.) вывел ее независимо и чуть позже (1952 г.).

екция траектории, есть $\left(\frac{1}{eB}\right)^2 S$, и

$$BS_r = \frac{2\pi\hbar}{|e|} \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

$$n - \text{целые числа} \gg 1. \quad (15)$$

Но произведение «магнитное поле \times площадь» есть поток магнитного поля. Условие (15) означает: электрон движется по траектории, охватывающей полуцелое число квантов потока магнитного поля $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{|e|}$. Подчеркнем: не поток магнитного поля квантуется, а траектория подстраивается под величину потока так, что

$$\Phi = \Phi_0 \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (16)$$

На рисунке 6 изображены квантованные траектории на поверхности Ферми (поверхность просто придумана). Еще одно утверждение, которое придется принять на веру (кажется последнее). Среди квантованных значений площади существенны для дальнейшего те, которым на поверхности Ферми соответствует экстремум по p_B (максимум или минимум — не так важно; лишь бы $\frac{\partial S}{\partial p_B} = 0$).

Теперь обратимся к рисунку 7, взятому из экспериментальных работ. На нем изображена зависимость магнитной восприимчивости монокристаллов рения (а) и серебра (б) от магнитного поля. Обратит внимание надо на то, что кривая, изображающая эту зависимость, *осциллирует*. Зависимость снята при температуре, близкой к абсолютному нулю. Осциллирующая зависимость магнитного момента и/или магнитной восприимчивости от магнитного поля носит название эффекта де Газа — ван Альфена. Осцилляционные эффекты характерны практически для всех металлов. Для их наблюдения нужны хорошие, чистые монокристаллы металла, низкая температура и достаточно сильное магнитное поле, чтобы величина μB превышала kT , оставаясь малой по сравнению с ϵ_F .

В чем причина осцилляции, т.е. периодической зависимости от магнитного поля B ? В повторяемости ситуации при изменении значения $\frac{1}{B}$ на величину $\frac{2\pi|e|\hbar}{S_{extr}^F}$, где S_{extr}^F — значение экстремальной по p_B пло-

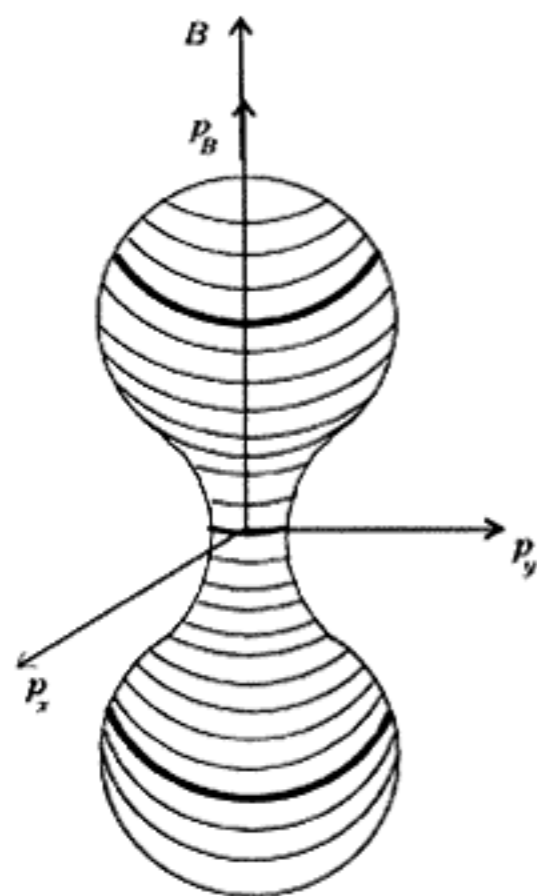


Рис.6. Кантованные траектории на поверхности Ферми. Выделены траектории, которые окружают экстремальные (по p_B) площади

щади сечения поверхности Ферми. Перепишем условие (14) так:

$$\frac{1}{B_1} = \frac{2\pi\hbar|e|}{S_{extr}^F} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (a)$$

$$\frac{1}{B_2} = \frac{2\pi\hbar|e|}{S_{extr}^F} \left(n + 1 + \frac{1}{2} \right). \quad (б)$$

Ситуация (а) отличается от ситуации (б) только тем, что в первом случае с энергией Ферми совпадает n -й уровень, а во втором — $(n+1)$ -й. Но n — все равно очень большое число, изменение на единицу номера уровня мало что меняет. В результате — повторение, осцилляции. Вычтя из уравнения (б) уравнение (а), получаем период осцилляционной зависимости

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{2\pi\hbar|e|}{S_{extr}^F}. \quad (17)$$

Полная теория эффекта де Гааза — ван Альфена на основе этой формулы была построена И.М.Лифшицем и его учеником А.М.Косевичем (тогда аспирантом) в 1953 году. Основное достоинство формулы (17) в том, что она была получена без предположения о характере зависимости энергии электрона от импульса. Следовательно, она годится для любого металла с поверхностью Ферми любой формы. Более того, она дает возможность решать обратную задачу — по экспериментальным данным, по осцилляционным кривым определять форму поверхности Ферми (об этом чуть ниже).

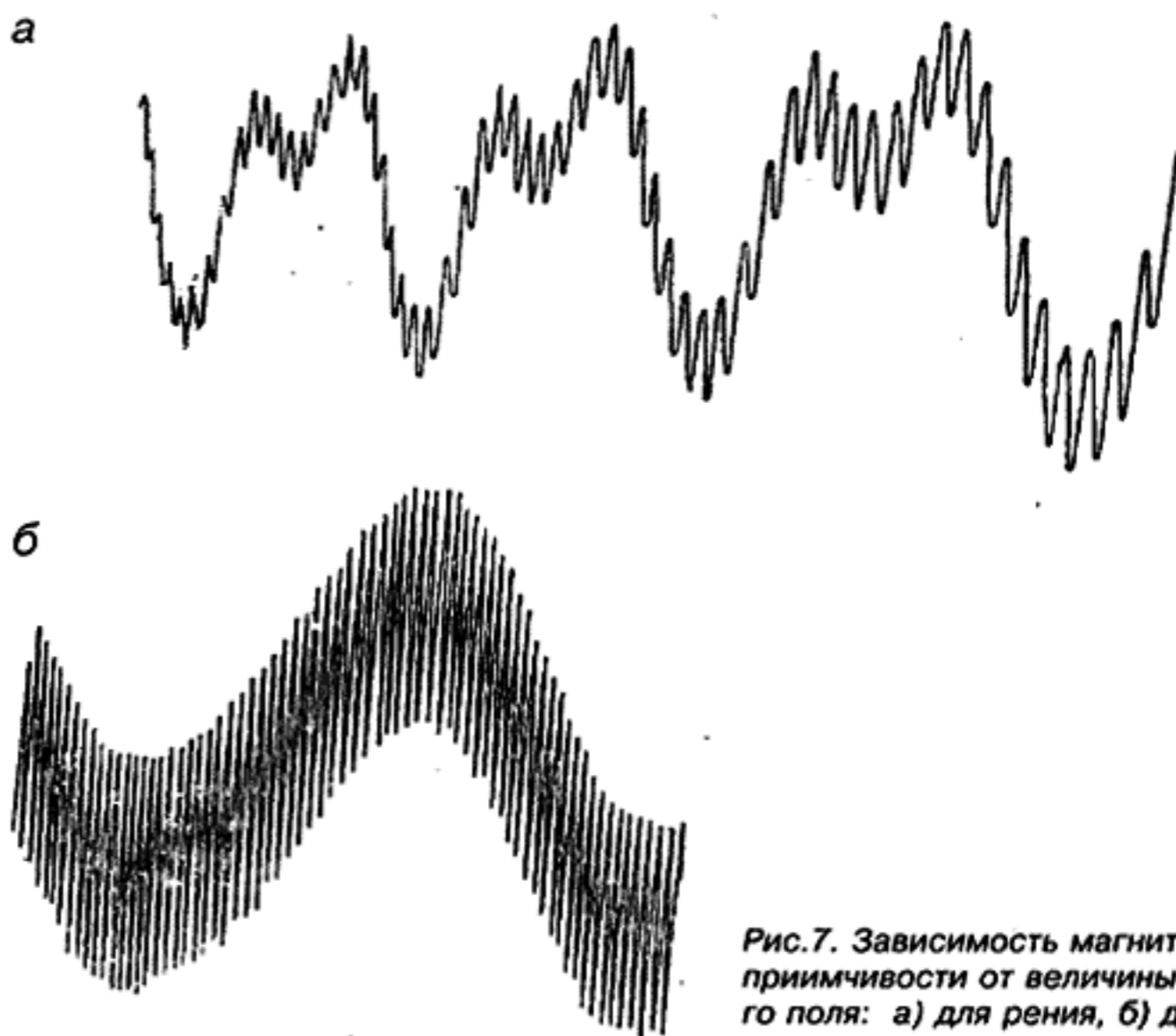


Рис.7. Зависимость магнитной восприимчивости от величины магнитного поля: а) для рения, б) для серебра

Теорию эффекта де Гааза — ван Альфена для свободных электронов, т.е. электронов в свободном от сил пространстве, построил Л.Д.Ландау в 30-х годах. Но его работа не могла быть опубликована, так как Ландау в это время был репрессирован (незаконно, как потом выяснилось). В экспериментальной работе, посвященной эффекту де Гааза — ван Альфена в висмуте (Д.Шенберг), вышедшей в Англии, результаты Ландау изложил его друг — физик-теоретик Р.Пайерлс, к этому времени бежавший из фашистской Германии и живший в Англии. Так в историю науки вплетается история стран и народов, часто, к сожалению, трагическая.

Для свободных электронов формула (17) содержит плотность электронов n_e , поскольку $S_{extr}^F = \pi p_F^2$, а $p_F = 2\pi\hbar \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3}$:

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{|e|}{\pi(2\pi\hbar)} \left(\frac{8\pi}{3n} \right)^{2/3} = \frac{2|e|}{\hbar} \frac{1}{(3\pi^2 n)^{2/3}}. \quad (18)$$

Когда существовала только эта формула для объяснения осцилляционных эффектов, то казалось, что осцилляционные эффекты можно наблюдать лишь в таких экзотических металлах, как висмут. Дело в том, что у висмута аномально мало электронов проводимости и поэтому период $\Delta \frac{1}{B}$ достаточно велик, т.е. наблюдаем. Работа И.М.Лифшица и

А.М.Косевича все «поставила на место»: поверхности Ферми металлов сложны, практически все поверхности Ферми обладают малыми сечениями с экстремальными (по p_B) площадями. Взгляните еще раз на рисунок 4!

Как же использовать формулу (17) для определения формы поверхности Ферми? Вспомним, что период определяется площадью сечения, проведенного перпендикулярно магнитному полю. Поворачивая кристалл и измеряя периоды, а значит площади сечений поверхности Ферми, имеющие экстремум по p_B , мы можем «прощупать» всю поверхность. И.М.Лифшиц вместе с известным геометром А.В.Погореловым даже вывели специальную формулу, дающую возможность по угловой зависимости периода осцилляций построить поверхность Ферми (1954 г.).

Уже говорилось, что в настоящее время известны поверхности Ферми большинства металлов. Наибольшую информацию о поверхностях Ферми получили из сравнения экспериментальных данных по осцилляционным эффектам с формулой, которую вывели Илья Михайлович Лифшиц и Арнольд Маркович Косевич.