

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЕ УРОВНИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ В МЕТАЛЛАХ С ЛИНИЯМИ ВЫРОЖДЕНИЯ ЗОН

Г. П. Микитик*, Ю. В. Шарлай

Физико-технический институт низких температур им. Б. И. Веркина
Национальной академии наук Украины
310164, Харьков, Украина

Поступила в редакцию 7 августа 1997 г.,
после переработки 27 февраля 1998 г.

Показано, что при расчете квазиклассических уровней энергии электронов в магнитном поле H необходимо учитывать, зацеплены или нет за линию вырождения зон соответствующие электронные траектории в пространстве волновых векторов \mathbf{k} . Результаты расчета в этих двух случаях отличаются друг от друга на величину $|e|\hbar/2m^*c$, где e — заряд электрона, а m^* — его циклотронная масса. Подобный сдвиг уровней энергии имеет топологическую природу, и его существование не зависит ни от конкретного вида закона дисперсии электронов $\epsilon(\mathbf{k})$ в окрестности траектории, ни от ее формы и размеров. Он связан с тем, что электронная орбита зацеплена за линию особых точек блоховских волновых функций, какой является линия вырождения зон. Описанный эффект во многом аналогичен эффекту Ааронова–Бома, если линию вырождения зон рассматривать как бесконечно тонкий «соленоид». Упомянутый сдвиг уровней энергии должен проявляться при изучении осцилляционных явлений в металлах. Приведены примеры металлов, в которых условия для обнаружения такого сдвига, по-видимому, наиболее благоприятны.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вырождение электронных энергетических зон вдоль линий зоны Бриллюэна — достаточно распространенное явление в кристаллах. Помимо закономерного вырождения на осях симметрии кристалла весьма часто имеет место и случайный контакт зон либо вдоль некоторых замкнутых линий в зоне Бриллюэна, либо на кривых, оканчивающихся на ее границах [1]. Возможность подобного случайного вырождения зон для кристаллов с центром инверсии (большинство металлов относятся к их числу, и только такие из них мы рассматриваем в этой работе) вытекает из следующего утверждения. Если на оси симметрии кристалла существует точка случайного контакта зон и межзонный матричный элемент оператора скорости отличен от нуля в этой точке, то через нее обязательно проходит и линия вырождения зон [1]. Отсюда же следует и утверждение о распространенности подобных линий, поскольку численные расчеты зонной структуры металлов часто обнаруживают точки случайного вырождения зон на осях симметрии зоны Бриллюэна (см., например, [2]). При этом, зная представления группы волнового вектора, по которым преобразуются волновые функции соответствующих зон, можно сразу установить, отличен от нуля межзонный матричный элемент оператора скорости или нет. Примерами кристаллов, в которых имеются линии случайного контакта зон,

* E-mail: mikitik@ilt.kharkov.ua

могут служить алюминий, бериллий, магний, цинк, кадмий и ряд других. Строго говоря, случайное вырождение зон существует только в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, а его учет приводит к снятию вырождения. Однако если это взаимодействие слабое, то по-прежнему будет происходить сильное сближение зон в окрестности той линии, на которой имел место их контакт без учета взаимодействия. Таким образом, понятие линии вырождения зон вполне физически оправдано и при наличии спин-орбитального взаимодействия, если только вызванное им характерное расщепление Δ энергий вырожденных электронных состояний значительно меньше E_0 — типичного зазора между зонами в кристалле ($E_0 \sim 1-10$ эВ).

Квазиклассическое квантование энергии электрона в металле при наличии внешнего магнитного поля H рассматривалось в целом ряде работ [3–12]. Квазиклассическая электронная траектория в пространстве волновых векторов \mathbf{k} представляет собой, как известно, линию пересечения изоэнергетической поверхности $\varepsilon = \text{const}$ с плоскостью, перпендикулярной магнитному полю, направление которого здесь и ниже выбираем за ось z . Для замкнутых электронных орбит без самопересечения правило квантования имеет вид

$$S(\varepsilon, k_z) = 2\pi \frac{|e|H}{\hbar c} \left(n + \gamma \pm \frac{gm^*}{4m} \right), \quad (1)$$

где S — площадь сечения изоэнергетической поверхности плоскостью $k_z = \text{const}$; n — большое целое положительное число; γ — постоянная ($0 \leq \gamma < 1$); g — электронный g -фактор, который в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием (и фермижидкостными эффектами) равен двум; e и m — заряд и масса электрона, а m^* — его циклотронная масса. В том случае, когда при анализе того или иного физического эффекта допустимо пренебречь не только спин-орбитальным взаимодействием, но и спином электрона, последний член в правой части (1) опускают, т.е. полагают $g = 0$ (по определению g -фактор характеризует энергетическое расщепление состояний частицы в магнитном поле, связанное с ее спином). Если квазиклассическая траектория в \mathbf{k} -пространстве проходит в достаточном удалении от особых точек функции $\varepsilon(\mathbf{k})$, описывающей закон дисперсии электрона в кристалле, и нигде вблизи траектории не нарушается условие квазиклассичности (в частности, не обращаются в нуль x - и y -проекции скорости электрона), то постоянная γ имеет универсальное значение [5] (см. также [13]):

$$\gamma = 1/2. \quad (2)$$

Именно оно обычно используется в формулах, которыми описываются осцилляционные эффекты в металлах (эффекты де Гааза–ван Альфена, Шубникова–де Гааза и др.) [14]. Указанным выше условиям на квазиклассическую траекторию, при которых справедливо (2), можно придать наглядный геометрический вид. Помимо естественно-го требования к величине площади сечения,

$$\frac{|e|H}{\hbar c S} \approx \frac{1}{n} \ll 1, \quad (3a)$$

они сводятся к тому, чтобы исключить из рассмотрения квазиклассические орбиты, которые слишком близко подходят к каким-либо иным траекториям в \mathbf{k} -пространстве, принадлежащим той же или другим зонам. Условие не слишком сильного сближения

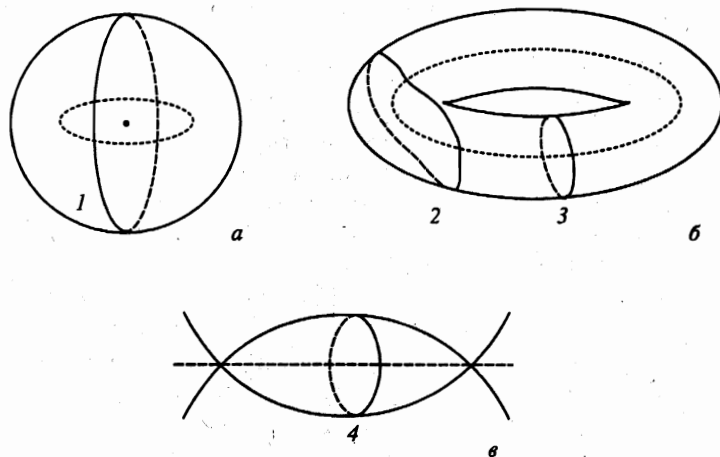


Рис. 1. Некоторые случаи взаимного расположения квазиклассических траекторий (кривые 1–4) и линий вырождения зон (штрихи) в случаях односвязной (а), неодносвязной (б) и самопересекающейся (в) поверхностей Ферми. Траектории 3 и 4 зацеплены за линию вырождения зон, а траектории 1 и 2 — нет

траекторий означает, что вероятность магнитного пробоя (как внутризонного, так и межзонного) должна быть мала, т. е.

$$\frac{|e|H}{\hbar c \delta S} \ll 1, \quad (36)$$

где $\delta S \sim (\delta k)^2$, δk — минимальное расстояние, на которое сближаются траектории (или разные участки одной орбиты) в зоне Бриллюэна, а δS — характерная площадь «перешейка» их разделяющего. В той области энергий или k_z , где нарушается (36), система квазиклассических орбит в пространстве волновых векторов близка к тому, чтобы изменить свою топологию, а величина γ существенно зависит от ϵ и k_z [6, 7, 10]. Мы не будем рассматривать такие случаи и в дальнейшем всегда предполагаем выполненными условия (3).

В настоящей работе показано, что в том простейшем случае, когда полностью пренебрегается спином электрона ($g = 0$), кроме (2) на самом деле может иметь место и

$$\gamma = 0, \quad (4)$$

если электронная траектория охватывает либо линию случайного контакта двух зон, либо ось симметрии третьего порядка, на которой осуществляется закономерное вырождение рассматриваемой зоны и некоторой другой. Этот результат не зависит ни от конкретного вида закона дисперсии электрона $\epsilon(\mathbf{k})$ в окрестности его квазиклассической траектории, ни от формы и степени удаленности этой траектории от линии контакта зон и имеет топологическую природу. Он связан с тем, что эта траектория зацеплена [15] (рис. 1) за линию особых точек блоховских электронных функций (и функции $\epsilon(\mathbf{k})$), какой является линия вырождения зон. Если же подобного зацепления нет, то справедливо равенство (2). При «включении» слабого спин-орбитального взаимодействия и учета спина электрона для тех траекторий, для которых имело место (4), вновь восстанавливается значение (2), но при этом g -фактор оказывается существенно отличным

от двойки:

$$g \approx 2 \pm 2 \frac{m}{m^*}, \quad (5)$$

где знак в правой части определяется электронными состояниями на линии контакта зон. Отметим, подстановка в (1) второго чисто орбитального слагаемого в этом выражении приводит к энергетическому спектру, совпадающему с тем, что получается в простейшем бесспиновом случае (при этом необходимо иметь в виду, что значения $\gamma = 0$ и $\gamma = 1$ эквивалентны). Таким образом, хотя при учете спин-орбитального взаимодействия вырождение зон на линии, строго говоря, снимается, результат (4) устойчив по отношению к включению этого взаимодействия, если только оно не слишком сильное, $\Delta \ll E_0$ (заметим, что критерий слабости взаимодействия совпадает с условием, при котором само понятие линии вырождения зон имеет смысл).

Во втором разделе настоящей работы приведена сводка формул, позволяющих определять γ и g -фактор для любой замкнутой траектории без самопересечений, удовлетворяющей условиям (3). Эти формулы используются в следующих разделах для анализа случая, когда в металле имеется линия вырождения зон. При этом для выяснения существа вопроса в третьем разделе работы рассматривается простейший случай (спин-орбитальным взаимодействием и спином электрона пренебрегается). Учет спина и спин-орбитального взаимодействия выполнен в четвертом разделе. В Заключение обсуждаются возможные экспериментальные проявления полученных результатов.

2. ПАРАМЕТР γ И g -ФАКТОР

Правило квантования энергии (1) и выражения для γ и g -фактора могут быть получены по следующей схеме. С использованием соответствующего гамильтониана находится волновая функция электрона во втором порядке по малому параметру (3а). Затем накладывается условие ее однозначности (при обходе по квазиклассической траектории изменение фазы волновой функции должно сводиться к $2\pi n$), которое и дает все необходимые результаты. Выражения, позволяющие рассчитывать γ и g -фактор для замкнутых орбит как без учета, так и с учетом спин-орбитального взаимодействия, были получены в [9]¹⁾ на основе эффективного однозонного гамильтониана блоховского электрона в магнитном поле [16, 17]. Для нас важно, что при выполнении условий (3) этот гамильтониан может быть использован в случае вырождения зон [17]. Приведем некоторые результаты работ Рос [9] и Блаунта [17], которые потребуются при дальнейшем анализе.

Эффективный однозонный гамильтониан блоховского электрона в магнитном поле представим в виде ряда по степеням H [17]. Для определения интересующих нас γ и g -фактора достаточно удержать в этом ряде два первых члена. Тогда в \mathbf{K} -представлении этот гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \varepsilon_0^{(s)}(\hat{\mathbf{k}}) + \frac{e}{c} H m_0^{(s)}(\hat{\mathbf{k}}), \quad (6)$$

¹⁾ В [9] схема вывода соответствующих формул несколько отличается от описанной, но результаты, конечно, совпадают в обоих случаях.

где $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ — закон дисперсии электрона в рассматриваемой зоне, которую мы здесь и далее отмечаем индексом «нуль». Символ «s» у функций $\varepsilon_0(\hat{\mathbf{k}})$ и $m_0(\hat{\mathbf{k}})$ означает, что эти функции должны быть полностью симметризованы по компонентам оператора $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{K} - (e/\hbar c)\hat{\mathbf{A}}(i\partial/\partial\mathbf{K})$, где $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — векторный потенциал магнитного поля. Функцию $m_0(\mathbf{k})$ можно представить в виде

$$m_0(\mathbf{k}) = (i_z[\mathbf{v}\Omega]) + \frac{\hbar}{2i} \sum_{l \neq 0} \frac{(v_x)_{0l}(v_y)_{l0} - (v_y)_{0l}(v_x)_{l0}}{\varepsilon_l(\mathbf{k}) - \varepsilon_0(\mathbf{k})}, \quad (7)$$

где i_z — орт вдоль направления магнитного поля, $\mathbf{v} = (1/\hbar)(\partial\varepsilon_0/\partial\mathbf{k})$, $(v)_{0l}$ — межзонный матричный элемент оператора скорости, вычисленный в точке \mathbf{k} , а Ω — периодическая по \mathbf{k} часть оператора координаты:

$$\Omega(\mathbf{k}) = i \int_v u_{k0}^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} u_{k0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (8)$$

Здесь $u_{kl}(\mathbf{r})$ — периодический множитель, входящий в блоховскую волновую функцию электрона l -й зоны, а интегрирование проводится по ячейке v кристаллической решетки. Приведенные выше формулы непосредственно применимы в случае, когда пренебрегается спином электрона. При его учете все электронные состояния в кристалле с центром инверсии двукратно вырождены, и зонный индекс теперь следует рассматривать как совокупность собственно зонного l и спинорного ρ ($\rho = 1, 2$) индексов. Соответственно периодический блоховский множитель $u_{kl}(\mathbf{r})$ переходит в периодический спинор $u_{kl\rho}(\mathbf{r})$, а все входящие в (7), (8) величины являются двумерными матрицами по индексу ρ . Кроме того, в (7) должен быть добавлен чисто спиновый вклад в гамильтониан:

$$\frac{\hbar}{m} s_{\rho\rho'} = -\frac{\hbar}{2m} \int_v u_{k0\rho}^*(\mathbf{r}) \sigma_3 u_{k0\rho'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (9)$$

где σ_3 — матрица Паули.

Как уже отмечалось, $g = 0$ в том простейшем случае, когда полностью пренебрегается спином электрона. В этом случае при выполнении условий (3) квазиклассическое квантование энергии приводит к следующему результату [9]:

$$\gamma - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} \frac{m_0(\mathbf{k})}{v_{\perp}(\mathbf{k})} d\mathbf{k}, \quad (10)$$

где интеграл берется по замкнутой квазиклассической траектории Γ в \mathbf{k} -пространстве, т. е. по линии пересечения поверхности $\varepsilon_0 = \text{const}$ с плоскостью $k_z = \text{const}$ ($d\mathbf{k}$ — элемент дуги этой траектории), а v_{\perp} — абсолютная величина проекции вектора \mathbf{v} на плоскость (k_x, k_y) . Обычно считается, что в кристалле с центром инверсии $m_0 = 0$, и поэтому $\gamma = 1/2$. Однако в следующем разделе работы будет показано, что при наличии в кристалле линии вырождения зон второй член в (6), вообще говоря, не равен нулю.

В случае, когда мы учитываем спин электрона, m_0 есть двумерная матрица. Эту матрицу удобно представить в виде линейной комбинации матриц Паули σ_i [18]:

$$(m_0)_{\rho\rho'} = -\frac{\hbar}{4m} \sum_{i=1}^3 G_{zi} \sigma_i, \quad (11)$$

где зависящие, вообще говоря, от \mathbf{k} коэффициенты G_{zi} определяются выражениями

$$\frac{\hbar}{4m} G_{zx} = -\operatorname{Re}(m_0)_{12}, \quad \frac{\hbar}{4m} G_{zy} = \operatorname{Im}(m_0)_{12}, \quad \frac{\hbar}{4m} G_{zz} = -(m_0)_{11}.$$

Отсутствие в разложении (11) единичной матрицы следует из поведения матрицы m_0 при преобразовании $U = (i\sigma_2)KI$ [18], где $I, K, i\sigma_2K$ — соответственно операторы пространственной инверсии, комплексного сопряжения и обращения времени. При этом также учитывается, что $u_{k2} = Uu_{k1}$. Равенство нулю следа матрицы (11) приводит к тому, что $\gamma = 1/2$, и m_0 дает вклад только в g -фактор. Последний может быть рассчитан с помощью выражения (см. формулу (64) в [9])

$$g = \frac{\hbar}{2\pi m^*} \oint_{\Gamma} \frac{d\kappa}{v_{\perp}} [G_{zz} + G_{zy} \operatorname{Im} \tau + G_{zx} \operatorname{Re} \tau], \quad (12)$$

где циклотронная масса m^* определяется хорошо известной формулой:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial S(\varepsilon, k_z)}{\partial \varepsilon} = \frac{\hbar}{2\pi} \oint_{\Gamma} \frac{d\kappa}{v_{\perp}}.$$

Комплексная функция $\tau(\kappa)$ определена на квазиклассической траектории Γ . Она задает направление единичного вектора \mathbf{e} в спинорном пространстве,

$$\mathbf{e} = \frac{1}{\sqrt{1 + |\tau|^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \tau \end{pmatrix},$$

который входит множителем в волновую функцию электрона ($\psi_{sc} \propto \exp(-i\hbar cS/eH)\mathbf{e}$). Функция $\tau(\kappa)$ находится из уравнения (оно может быть получено из уравнения (52) работы [9])

$$i \frac{4m}{\hbar} v_{\perp} \frac{d\tau}{d\kappa} + [G_- \tau^2 + 2G_{zz}\tau - G_+] = 0, \quad (13)$$

где $G_{\pm} \equiv G_{zz} \pm iG_{zy}$. Граничным условием к (13) служит равенство

$$\tau(0) = \tau(\kappa_0), \quad (14)$$

в котором κ_0 — длина квазиклассической траектории в \mathbf{k} -пространстве. Можно показать, хотя мы на этом не будем здесь останавливаться, что комплексное уравнение Риккати (13) с условием (14) имеет решение при любом κ_0 . Однако при произвольных $G_{zi}(\mathbf{k})$ невозможно найти это решение в квадратурах и, соответственно, нельзя получить явное выражение для g -фактора. В том частном случае, когда все G_{zi} можно считать постоянными [18], решениями уравнения (13) с граничным условием (14) являются

$$\tau = -\frac{G_{zz} \pm \sqrt{G_{zz}^2 + G_+ G_-}}{G_-}.$$

Подстановка этого выражения в (12) дает

$$g^2 = G_{zz}^2 + G_+ G_-,$$

что совпадает с результатом, полученным в [18].

3. ПРОСТЕЙШИЙ СЛУЧАЙ

В этом разделе, используя приведенные выше результаты, определим допустимые значения γ в том простейшем случае, когда полностью пренебрегается как спин-орбитальным взаимодействием, так и спином электрона. Казалось бы, уже из достаточно общих соображений следует, что в этом случае в кристаллах с центром инверсии всегда можно считать, что $m_0 = 0$. Действительно, в отсутствие спина введенный в предыдущем разделе оператор U есть просто произведение операторов пространственной инверсии и комплексного сопряжения [19]. Этот U переводит электронное состояние с волновым вектором \mathbf{k} в себя и, следовательно, подходящим выбором фаз волновых функций можно добиться, чтобы было выполнено условие

$$U u_{\mathbf{k}l}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}l}(\mathbf{r}). \quad (15)$$

Известно (см., например, [19] или [20]), что при таком выборе фаз все матричные элементы оператора скорости — вещественные величины, а $\Omega = 0$. Тогда из (7) сразу получаем $m_0 = 0$. Проанализируем теперь характер зависимости m_0 от выбора фаз блоховских множителей. Если изменить эти фазы так, что

$$u_{\mathbf{k}l} \rightarrow u'_{\mathbf{k}l} = u_{\mathbf{k}l} \exp(i\varphi_l(\mathbf{k})), \quad (16)$$

где $\varphi_l(\mathbf{k})$ — произвольные гладкие функции, заданные во всей зоне Бриллюэна, то

$$v_{ll'} \rightarrow v'_{ll'} = v_{ll'} \exp\{i[\varphi_{l'}(\mathbf{k}) - \varphi_l(\mathbf{k})]\}$$

и входящая в (7) сумма по l останется равной нулю. Что касается первого слагаемого в (7), представляющего собой полностью диагональный по номерам зон вклад в орбитальный момент электрона, то он не является величиной инвариантной к преобразованиям (16). Действительно, согласно (8) при таком преобразовании имеем

$$\Omega \rightarrow \Omega' = \Omega - \frac{\partial \varphi_0}{\partial \mathbf{k}}. \quad (17)$$

Следовательно, новое значение Ω , а вместе с ним и соответствующее значение m_0 будут, вообще говоря, отличны от нуля. Однако подобная неинвариантность m_0 не сказывается на физически измеримых величинах. Чтобы показать это в отношении параметра γ , перепишем формулу (10) с учетом того, что сумма по l в (7) равна нулю. В итоге находим

$$\gamma - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma} \Omega d\mathbf{k}, \quad (18)$$

где $d\mathbf{k} \equiv d\kappa[\mathbf{i}_z \mathbf{v}]/v_{\perp}$, а интегрирование идет по квазиклассической орбите Γ (поскольку скорости электрона в обычном и \mathbf{k} -пространствах взаимно ортогональны, $d\mathbf{k}$ направлен вдоль элемента орбиты в последнем из них). Из (17), (18) немедленно следует инвариантность γ при преобразованиях (16).

На самом деле, приведенные выше соображения о возможности обращения m_0 в нуль подходящим выбором фаз волновых функций полностью применимы только для

невырожденной зоны. Проанализируем теперь случай, когда в кристалле имеется линия контакта рассматриваемой зоны $l = 0$ с некоторой другой зоной $l = \lambda$. Оказывается [20], в этом случае невозможно выбрать фазы блоховских множителей так, чтобы, с одной стороны, имело место (15), а с другой — эти множители были непрерывными функциями \mathbf{k} в зоне Бриллюэна. Более конкретно утверждение можно сформулировать следующим образом. Если выполнено (15), то в \mathbf{k} -пространстве существует поверхность с краем, на которой $u_{k\lambda}$ и u_{k0} испытывают разрыв, а величина Ω сингулярна, причем край упомянутой поверхности совпадает с линией вырождения зон. Чтобы показать это, возьмем некоторую точку O на линии вырождения зон за начало отсчета \mathbf{k} и запишем гамильтониан электрона в отсутствие магнитного поля в представлении Латтинжера-Кона [21], т. е. используем в качестве базисных функции

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{0l}(\mathbf{r}),$$

которые отличаются от блоховских функций только тем, что множители u_{kl} взяты в точке $\mathbf{k} = 0$ (в самой этой точке оба набора функций совпадают). В этом представлении гамильтониан не диагонален по l . Чтобы не усложнять рассуждения техническими деталями, учтем в этом гамильтониане пока только две зоны: $l = 0$ и $l = \lambda$. Тогда он запишется в виде

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_{00} & E_{0\lambda} \\ E_{0\lambda}^* & E_{\lambda\lambda} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

где

$$E_{ij} = \hbar \mathbf{k} \mathbf{v}_{ij}(0) + \delta_{ij} \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m, \quad i, j = 0, \lambda,$$

δ_{ij} — символ Кронекера; $\mathbf{v}_{ij}(0)$ — матричные элементы оператора скорости, вычисленные при $\mathbf{k} = 0$. Энергию отсчитываем от энергии вырождения зон в точке $\mathbf{k} = 0$. Матрица перехода от представления Латтинжера-Кона к представлению Блоха имеет вид

$$S_{ij}(\mathbf{k}) = \langle u_{0i} | u_{kj} \rangle = \int u_{0i}^* u_{kj}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (20)$$

Эта унитарная матрица диагонализует гамильтониан (19), собственные значения которого определяют законы дисперсии электронов в блоховском представлении для зон 0 и λ :

$$\varepsilon_{0,\lambda} = \frac{1}{2}(E_{00} + E_{\lambda\lambda}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(E_{00} - E_{\lambda\lambda})^2 + |E_{0\lambda}|^2}. \quad (21)$$

Если выполнены условия (15), то как E_{ij} , так и все $S_{ij}(\mathbf{k})$ вещественны, и, следовательно, матрица S ортогональна. Для гамильтониана (19) ортогональная матрица S находится непосредственным расчетом (о степени произвола в выборе S смотри ниже) и может быть представлена в следующей форме:

$$S = \begin{pmatrix} \cos(\phi/2) & -\sin(\phi/2) \\ \sin(\phi/2) & \cos(\phi/2) \end{pmatrix}, \quad (22)$$

где

$$\begin{aligned}\sin \phi &= E_{0\lambda} / \delta \varepsilon, \\ \cos \phi &= (E_{00} - E_{\lambda\lambda}) / 2\delta \varepsilon, \\ \delta \varepsilon &= \sqrt{\frac{1}{4}(E_{00} - E_{\lambda\lambda})^2 + E_{0\lambda}^2}\end{aligned}\quad (23)$$

и $-\pi \leq \phi \leq \pi$. С ее помощью нетрудно определить зависимость блоховских множителей $u_{\mathbf{k}i}$ от \mathbf{k} , поскольку, согласно (20),

$$u_{\mathbf{k}i} = (S')_{i0} u_{00} + (S')_{i\lambda} u_{0\lambda}, \quad (24)$$

где S' — матрица, транспонированная по отношению к S . Теперь сформулированное утверждение легко обосновывается. Проведем через точку O плоскость, пересекающую линию контакта зон. В этой плоскости имеются две прямые, проходящие через точку O , на одной из которых обращается в нуль $E_{0\lambda}$, а на другой — разность $E_{00} - E_{\lambda\lambda}$ (рис. 2). Рассмотрим в плоскости замкнутый контур AA' , охватывающий точку O , и проследим за изменениями блоховских множителей при обходе по нему. Из (23) следует, что при таком обходе ϕ изменяется от $-\pi$ до π . При этом все элементы матрицы S , а значит, и $u_{\mathbf{k}i}$ — гладкие функции \mathbf{k} . Однако в результате обхода, согласно (22), (24), получаем, что $u_{\mathbf{k}i}|_{A'} = -u_{\mathbf{k}i}|_A$. Таким образом, на луче OA функции $u_{\mathbf{k}i}(\mathbf{k})$ испытывают разрыв. Несложно понять, что на самом деле имеется поверхность разрыва функций $u_{\mathbf{k}0}$ и $u_{\mathbf{k}\lambda}$, а луч является пересечением этой поверхности с выбранной нами плоскостью. Отметим, что при вычислении матрицы S остается произвол, связанный с тем, что при любом \mathbf{k} собственные векторы \hat{H} определены с точностью до знака. Это отвечает возможности выполнить в некоторой области зоны Бриллюэна замену $u_{\mathbf{k}i} \rightarrow -u_{\mathbf{k}i}$, которая, очевидно, не нарушает условия (15). Подобным преобразованием можно деформировать поверхность разрыва (в формулах (22), (23) это будет означать задание нового интервала допустимых значений ϕ : $\phi_0 \leq \phi \leq \phi_0 + 2\pi$, где ϕ_0 — некоторый угол). Однако сам факт существования разрывов функций $u_{\mathbf{k}i}$ при выполнении (15) не зависит от калибровки волновых функций (край поверхности разрыва всегда совпадает с линией вырождения зон). Всюду, где функции $u_{\mathbf{k}i}$ непрерывны, применимы соображения, приведенные в начале раздела, и $\Omega = 0$. На самой же поверхности разрыва величина Ω , как это следует из ее определения (8), сингулярна, и интеграл в (18) не равен нулю.

Строго говоря, с помощью двухзонного гамильтониана (19) можно достаточно хорошо описывать электронные состояния только в окрестности линии вырождения зон,

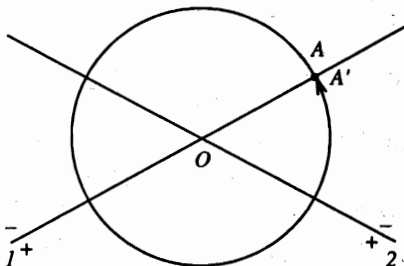


Рис. 2. Линии пересечения поверхностей $E_{0\lambda} = 0$ и $E_{00} - E_{\lambda\lambda} = 0$ с плоскостью, проходящей через точку O (соответственно прямые 1 и 2). Плюс и минус у линии 1 указывают знаки произведения $\mathbf{k}v_{0\lambda}(0)$ по обе стороны от нее. Около линии 2 указаны знаки $\mathbf{k}[v_{00}(0) - v_{\lambda\lambda}(0)]$

пока $|\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})| \ll E_0$, где E_0 — введенный выше энергетический масштаб, характеризующий зазоры в электронном спектре кристалла. Чтобы распространить сформулированные выше утверждения на любые значения \mathbf{k} , необходимо в гамильтониане Латтинжера–Кона учесть и другие зоны. В этом случае матрицу S можно представить как произведение двух ортогональных матриц, S_1 и S_2 . Первая из них обращает в нуль все E_{0l} и $E_{\lambda l}$ с $l \neq 0, \lambda$, т. е. приводит гамильтониан к блочному виду. При этом интересующий нас блок гамильтониана будет по форме совпадать с (19), но теперь в нем величины E_{ij} ($i, j = 0, \lambda$) имеют сложные зависимости от \mathbf{k} . Важно, однако, что как эти величины E_{ij} , так и элементы матрицы S_1 являются гладкими однозначными функциями волнового вектора (в том числе и на линии вырождения зон) [19], а $\mathbf{k}v_{ij}(0)$ есть просто первые члены разложений E_{ij} в ряды. Линия контакта зон представляет собой теперь линию пересечения двух поверхностей:

$$E_{0\lambda}(\mathbf{k}) = 0 \quad (25)$$

и

$$E_{00}(\mathbf{k}) - E_{\lambda\lambda}(\mathbf{k}) = 0. \quad (26)$$

Что касается матрицы S_2 , то она имеет блочный вид и та ее часть, которая представляет для нас интерес, может быть описана прежними формулами (22), (23). Сделанный выше вывод о существовании поверхности разрывов функций $u_{\mathbf{k}i}$ основывался на том, что при обходе линии вырождения зон угол ϕ изменялся на 2π . Это свойство остается верным и в общем случае, поскольку оно не связано с явным видом E_{ij} , а определяется только тем, что поверхности (25), (26) пересекаются друг с другом. Соответственно сохраняется справедливим и утверждение, что при наличии линий вырождения зон величины Ω можно обратить в нуль в окрестности любой точки, не принадлежащей этой линии, но нельзя это сделать сразу на всей замкнутой кривой, ее охватывающей. Отметим также, что в случае, когда вырождение зон отсутствует (поверхности (25) и (26) не пересекаются), при обходе по любому замкнутому контуру угол ϕ изменяется менее чем на 2π и в итоге возвращается к исходному значению. В такой ситуации можно добиться, чтобы при выполнении (15) $u_{\mathbf{k}i}$ были непрерывными функциями \mathbf{k} , а $\Omega = 0$ во всей зоне Бриллюэна.

Остановимся теперь на случае закономерного вырождения двух зон на оси симметрии зоны Бриллюэна. Если это ось четвертого или шестого порядка, то в разложениях левых частей выражений (25) и (26) по \mathbf{k} отсутствуют линейные члены и один из рядов начинается с члена $k_1 k_2$, а другой — с $k_1^2 - k_2^2$ (k_3 вдоль оси симметрии) [19]. Теперь каждое из равенств (25) или (26) определяет две поверхности, пересекающиеся по прямой $k_1 = k_2 = 0$. Анализ, аналогичный изложенному выше, показывает, что при обходе по замкнутому контуру вокруг такой оси угол ϕ изменяется на 4π , и следовательно, $u_{\mathbf{k}i}$ можно выбрать непрерывными функциями \mathbf{k} при соблюдении (15). Отметим, что в этом специальном случае, как следует из (21), по мере удаления волнового вектора от оси энергии зон расщепляются квадратично по $k_\perp = \sqrt{k_1^2 + k_2^2}$. Если же закономерное вырождение зон происходит на оси симметрии третьего порядка, то, так же как и при их случайном контакте, разложение левых частей выражений (25) и (26) начинается с линейных по \mathbf{k} членов [19] и справедливы приведенные выше результаты. Для этого случая характерно линейное по k_\perp расщепление зон.

Поскольку подходящим выбором фаз волновых функций можно сделать $\Omega = 0$ в

окрестности любой точки, не лежащей на линии вырождения зон, в этой точке

$$\text{rot } \Omega = 0 \quad (27)$$

(операция ротор выполняется в \mathbf{k} -пространстве). При этом, ввиду инвариантности $\text{rot } \Omega$ по отношению к преобразованию (17), равенство (27) на самом деле справедливо при любом выборе фаз волновых функций. На линии же вырождения зон значение $\text{rot } \Omega$ не определено. Это следует из того, что такая линия представляет собой линию особых точек блоховского множителя $u_{\mathbf{k}l}$, если его рассматривать как функцию \mathbf{k} [19] (см. формулы (21)–(24)). Что касается интеграла от Ω по замкнутому контуру, охватывающему линию контакта зон, то его значение не только инвариантно по отношению к преобразованию (16), но также, согласно (27), не зависит от формы и размеров контура. Чтобы определить это значение, откажемся от ограничения (15) и выберем фазы блоховских множителей исходя только из требования непрерывности $u_{\mathbf{k}l}$ в \mathbf{k} -пространстве (последнее подразумевалось при выводе правила квантования энергии). Для этого в рассмотренном выше случае достаточно взять $\phi_l = q\phi/2$ для $l = 0, \lambda$ и выполнить преобразование $u_{\mathbf{k}l}$, совпадающее по форме с (16). Здесь, вообще говоря, q — любое нечетное число, но учет спин-орбитального взаимодействия показывает (см. ниже), что следует ограничиться $q = \pm 1$. Тогда новая величина $\Omega = \pm(1/2)\partial\phi/\partial\mathbf{k}$, а

$$\oint \Omega d\mathbf{k} = \pm\pi, \quad (28)$$

где интегрирование идет по любому контуру, охватывающему линию вырождения зон, а знак правой части определяется направлением интегрирования (и знаком q). В случае закономерного вырождения зон на оси симметрии четвертого или шестого порядка соответствующий интеграл равен нулю.

Полученных результатов достаточно, чтобы найти γ при любом взаимном расположении траекторий и линии контакта зон. Если квазиклассическая траектория зацеплена за линию случайного вырождения зон (или за ось симметрии третьего порядка, на которой имеет место закономерное вырождение), то, согласно изложенному выше, $\gamma - 1/2 = \pm 1/2$. Учитывая, что простое переобозначение в (1) n на $n - 1$ переводит $\gamma = 1$ в $\gamma = 0$, приходим в рассматриваемом случае к результату (4). Если же зацепления нет, то, согласно известной теореме [15], обязательно существует поверхность с краем, совпадающим с траекторией, т. е. натянутая на траекторию пленка, которая не пересекается с линией контакта зон (на рис. 1 для траекторий 1 или 2 в качестве такой пленки может быть взята часть изображенной изоэнергетической поверхности). Преобразуя интеграл (18) с помощью формулы Стокса в интеграл по указанной поверхности и используя (27), получаем (2).

В заключение этого раздела отметим аналогию, которая существует между полученным здесь результатом и эффектом Ааронова–Бома [22]. Еще Блаунт [20] указал на сходство Ω с векторным потенциалом магнитного поля (см. формулы (16), (17)). Тогда равенства (27) и (28) позволяют рассматривать линию вырождения зон как бесконечно тонкий «соленоид», который несет определенный поток, создаваемый «полем» $\text{rot } \Omega$. Как только такое соответствие понятий установлено, упомянутая аналогия легко прослеживается. Действительно, хотя электрон, двигаясь по квазиклассической орбите, охватывающей линию вырождения зон, не попадает в ту область, где сосредоточено «поле», он испытывает воздействие «векторного потенциала» Ω , который не может быть

сделан равным нулю на всей траектории. Квазиклассическое стационарное состояние электрона с энергией, определяемой (1), представляет собой стоячую волну, образованную интерференцией двух волн, бегущих в противоположных направлениях. Наличие линии вырождения зон, т. е. «соленоида», внутри траектории сдвигает интерференционную картину по сравнению со случаем, когда такой линии нет. Этот сдвиг проявляется как изменение γ . Отметим также, что этот сдвиг имеет такую величину, какую вызвало бы введение настоящего соленоида с потоком, равным кванту магнитного потока $\pi\hbar c/|e|$, внутрь орбиты электрона в реальном координатном пространстве.

4. УЧЕТ СПИНА И СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Учтем сначала спин электрона, пренебрегая по-прежнему спин-орбитальным взаимодействием. Теперь все зоны двукратно вырождены по проекции спина на некоторую ось, и блоховские множители $u_{kl\rho}$ представляют собой произведения рассмотренных выше функций для бесспиновой частицы u_{kl} на постоянные спиноры s_ρ , т. е. $u_{kl1} = u_{kl}s_1$, а $u_{kl2} = Uu_{kl1} = (K\Gamma u_{kl})s_2$, где $s_2 = i\sigma_2 s_1$ (именно таким образом выбранная величина u_{kl2} получается в пределе бесконечно слабого спин-орбитального взаимодействия). Из ортогональности s_1 и s_2 следует, что орбитальные части G_{zx} и G_{zy} равны нулю. Если выбрать

$$s_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

то это же верно и для их спиновых частей, и в целом $G_{zx} = G_{zy} = 0$. Тогда формула (12) с учетом равенства нулю суммы в (7) может быть переписана следующим образом:

$$g = -\frac{2m}{\pi m^*} \oint_{\Gamma} \frac{d\kappa}{v_{\perp}} (m_0)_{11} = 2 - \frac{2m}{\pi m^*} \oint_{\Gamma} \Omega d\kappa.$$

Здесь первый член в правой части происходит от чисто спинового вклада (9) в m_0 , а интеграл во втором члене совпадает с интегралом в (18). Принимая во внимание (28), получаем формулу (5). При этом знак в (5) остается неопределенным, поскольку без учета спин-орбитального взаимодействия корреляция спина и орбитального движения электрона отсутствует.

Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к тому, что блоховские множители $u_{kl\rho}$ не сводятся теперь к произведениям $u_{kl}s_\rho$, а представляют собой линейные комбинации функций $u_{kl'}s_{\rho'}$ с разными l' и ρ' . Величина «подмешивания» этих функций к $u_{kl}s_\rho$ оценивается как $\Delta/\delta\varepsilon(\mathbf{k})$, где $\delta\varepsilon(\mathbf{k})$ имеет порядок расстояния по энергии от рассматриваемой до ближайшей к ней другой зоны. Тот же порядок величины будут иметь и поправки к g -фактору, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием. При $\Delta \ll E_0$ эти поправки малы ($\sim \Delta/E_0$) для квазиклассических орбит, удаленных от линии вырождения зон. Однако они могут стать довольно большими для траекторий, близких к указанной линии. Поэтому, чтобы оценить величину поправок к результату (5), проведем расчет g -фактора для наиболее «опасных» орбит. При этом используем двухзонную модель электронного энергетического спектра (19), в которой связанное со спин-орбитальным взаимодействием наиболее сильное перепутывание функций $u_{kl}s_\rho$

и $u_{\mathbf{k}\lambda} s_{\rho'}$ учитываем точно, а «подмешиванием» волновых функций других зон пренебрегаем. Это обеспечит точность расчета g -фактора порядка Δ/E_0 , вполне достаточную для анализа больших поправок.

После учета спин-орбитального взаимодействия приходим к новому гамильтониану, заменяющему в представлении Латтинжера–Кона гамильтониан (19):

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \tilde{E}_{00} & \tilde{E}_{0\lambda} \\ \tilde{E}_{0\lambda}^+ & \tilde{E}_{\lambda\lambda} \end{pmatrix}, \quad (29)$$

где \tilde{E}_{ij} — двумерные матрицы:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{00} &= \left[\Delta + \frac{1}{2}(E_{00} + E_{\lambda\lambda}) \right] \hat{1}, \\ \tilde{E}_{\lambda\lambda} &= \left[-\Delta + \frac{1}{2}(E_{00} + E_{\lambda\lambda}) \right] \hat{1}, \\ \tilde{E}_{0\lambda} &= E_{0\lambda} \hat{1} + \frac{i}{2}(E_{00} - E_{\lambda\lambda})(\beta\sigma). \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь 2Δ — величина спин-орбитального расщепления зон в точке $\mathbf{k} = 0$ (для определенности предполагаем, что $\Delta > 0$, т.е. рассматриваемая зона $l = 0$ лежит выше по энергии, чем зона $l = \lambda$), $\hat{1}$ — единичная матрица, σ_i — матрицы Паули, β — постоянный вещественный вектор единичной длины, характеризующий спин-орбитальное смешивание волновых функций рассматриваемых зон при $\mathbf{k} = 0$. Будем считать, что квазиклассическая траектория зацеплена за линию вырождения зон (определенную без учета спин-орбитального взаимодействия), и за начало отсчета \mathbf{k} принимаем точку пересечения этой линии с плоскостью орбиты (плоскостью $k_z = 0$). Считаем также, что при $\mathbf{k} = 0$ выполнено условие (15), и элемент $E_{0\lambda}$ — вещественный. Кроме того, в формулах (30) пренебрегаем членом $\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$, поскольку он становится существенным только в той области волновых векторов, в которой сама двухзонная модель уже плохо описывает энергетический спектр. Наконец, вводим следующие обозначения:

$$2\mathbf{a} = \hbar [\mathbf{v}_{00}(0) + \mathbf{v}_{\lambda\lambda}(0)],$$

$$2\mathbf{a}' = \hbar [\mathbf{v}_{00}(0) - \mathbf{v}_{\lambda\lambda}(0)],$$

$$\mathbf{t} = \hbar \mathbf{v}_{0\lambda}(0).$$

Тогда из (29), (30) следует, что закон дисперсии электрона $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ может быть записан в виде

$$\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \mathbf{a}\mathbf{k} + \sqrt{\Delta^2 + (\mathbf{a}'\mathbf{k})^2 + (\mathbf{t}\mathbf{k})^2}, \quad (31)$$

а соответствующая формула для $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ отличается только знаком перед квадратным корнем. Укажем теперь путь вычисления величины m_0 , знание которой даст возможность рассчитывать g -фактор по формулам из разд. 2. Принимая во внимание определения Ω (8) и матрицы S (20), а также известную связь между межзонными матричными элементами оператора скорости и координаты [13], можно получить соотношение

$$\left(S^+ \frac{\partial S}{\partial \mathbf{k}} \right)_{0\rho, l\rho'} = -i\delta_{0l}\Omega_{\rho\rho'}(\mathbf{k}) - (1 - \delta_{0l})\hbar \frac{v_{0\rho, l\rho'}(\mathbf{k})}{\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \varepsilon_l(\mathbf{k})}, \quad (32)$$

которое позволяет по известной матрице $S(\mathbf{k})$ находить $\Omega_{\rho\rho'}$ и $\nu_{0\rho,l\rho'}$ в любой точке зоны Бриллюэна, а по ним орбитальную часть $m_0(\mathbf{k})$. Что касается спинового вклада в m_0 (9), то он вычисляется на основе равенства

$$s_{\rho\rho'} = (S^+ s(0) S)_{0\rho,0\rho'},$$

где $s(0)$ — матрица, описывающая этот вклад в представлении Латтинжера–Кона, $s(0) = -(1/2)\langle u_{0l\rho} \sigma_3 u_{0l\rho'} \rangle$. Эта матрица находится вместе с гамильтонианом (29) и в данном случае равна

$$s(0) = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \beta_z(\beta\sigma) & [\sigma\beta]_z \\ [\sigma\beta]_z & \beta_z(\beta\sigma) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, вычисление $m_0(\mathbf{k})$ сводится к определению преобразования S , которое диагонализует гамильтониан, записанный в представлении Латтинжера–Кона. Приведем теперь конечные результаты расчета g -фактора в двухзонной модели энергетического спектра (29), (30).

Пренебрегая спиновым вкладом в m_0 (9), проанализируем сначала орбитальную часть g -фактора. В этом случае можно найти такое S , что m_0 окажется диагональной матрицей по спиновому индексу и, соответственно, $G_{zx} = G_{zy} = 0$. Для G_{zz} получаем

$$G_{zz} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{(\mathbf{i}_z[\mathbf{a}'\mathbf{t}])(\epsilon + \Delta)}{\delta\epsilon(\delta\epsilon + \Delta)}, \tag{33}$$

где

$$\delta\epsilon \equiv \sqrt{\Delta^2 + (\mathbf{a}'\mathbf{k})^2 + (\mathbf{tk})^2}.$$

Результат для g -фактора представим в виде

$$g = g_1 + g_2,$$

где g_1 — внутризонный вклад в эту величину, обусловленный первым слагаемым в (7), а межзонный вклад g_2 определяется входящей в m_0 суммой по l . Для g_1 и g_2 имеем

$$g_1 = 2 \operatorname{sign}(\mathbf{i}_z \nu) \frac{m}{m^*} \left(1 - \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_{min}^2 + \Delta^2}} \right), \tag{34}$$

$$g_2 = 2 \operatorname{sign}(\mathbf{i}_z \nu) \frac{m}{m^*} \frac{\Delta}{\sqrt{\epsilon^2 - \epsilon_{min}^2 + \Delta^2}}.$$

Здесь $\operatorname{sign} x = 1$ для $x > 0$ и $\operatorname{sign} x = -1$ для $x < 0$, $\nu \equiv [\mathbf{a}'\mathbf{t}]$, а ϵ_{min} — минимальное значение выражения (31) при $k_z = 0$. Такое минимальное значение обязательно существует, если орбита замкнута ($\epsilon_{min} \propto \Delta$ и $0 < (\epsilon_{min}/\Delta) \leq 1$). Из формул (34) следует, что, хотя величина связанных со спин-орбитальным взаимодействием вкладов в g_1 и g_2 имеет порядок $g(\Delta/\epsilon)$ и может быть достаточно большой, эти вклады точно компенсируют друг друга. Таким образом, не только для орбит, удаленных от линии вырождения зон, но и для квазиклассических траекторий, близких к ней, спин-орбитальное взаимодействие дает в целом лишь относительно малую поправку (порядка Δ/E_0) к рассмотренной здесь орбитальной части g -фактора. В связи с формулами (34) заметим еще

следующее. Уже довольно давно известен результат $|g| = 2m/m^*$, полученный Коэном и Блаунтом [18] в рамках двухзонной модели электронного энергетического спектра. Однако в [18] рассматривались квазиклассические траектории, расположенные вблизи точки экстремума закона дисперсии электрона (т. е. при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_{min}$), и учитывался лишь межзонный вклад в g -фактор, поскольку v , а значит, и g_1 равны нулю при $\varepsilon = \varepsilon_{min}$. Формулы (34) обобщают результат Коэна и Блаунта на орбиты с энергиями в интервале $\varepsilon_{min} \leq \varepsilon \ll E_0$, причем при $\varepsilon \gg \Delta$ главным является внутризонный вклад в g -фактор. Отметим также, что для гамильтониана (29), (30) известен точный спектр электрона в магнитном поле [23], полученный без учета прямого взаимодействия спина с H . Выражения (34) вместе с (1) и (2) определяют электронные энергетические уровни, которые совпадают с точным результатом при всех n , в том числе и $n = 0$.

Если наряду с орбитальным учесть и спиновый вклад в m_0 (9), то в правую часть (33) добавится член

$$\delta G_{zz} = 2\beta_z, \quad (35)$$

а кроме того, теперь будут отличны от нуля G_{zx} и G_{zy} :

$$G_{zx} - iG_{zy} = 2(\beta_y + i\beta_x) [(tk) + i(a'k)] / \delta\varepsilon. \quad (36)$$

В g -факторе помимо орбитального вклада (34) появится и спиновая часть g_s , которая может быть рассчитана по формуле (12), если в последней G_{zz} заменить на δG_{zz} . Непосредственным расчетом можно проверить, что при $\Delta = 0$ функция

$$\tau_0 = \frac{1 - \beta_z}{\beta_y + i\beta_x} \frac{(tk) + i(a'k)}{\delta\varepsilon},$$

заданная на квазиклассической траектории: $k_z = 0$, $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \varepsilon$ является точным решением уравнения (13) с условием (14). Подстановка этой функции в формулу для g_s дает, как и должно быть, $g_s = 2$. Из выражений (33), (35), (36) следует, что при $\Delta \neq 0$ решение уравнения (13) будет отличаться от τ_0 на величину порядка $\tau_0(\Delta/\varepsilon)$. Соответственно поправка к g_s будет $\delta g_s \sim (\Delta/\varepsilon)$. Учитывая, что $g \sim (m/m^*) \sim (E_0/\varepsilon)$, получаем оценку $(\delta g_s/g) \sim (\Delta/E_0)$, из которой следует, что в рассматриваемом приближении спин-орбитальное взаимодействие не влияет на спиновый вклад в g -фактор.

Принимая во внимание (34), окончательно находим

$$g = 2 + 2 \text{sign}(i_z \nu) \frac{m}{m^*}. \quad (37)$$

Отметим, что учет спин-орбитального взаимодействия позволил установить знак, с которым орбитальная часть входит в g -фактор (а также подтвердил выбор q , сделанный при получении (28)). При этом, хотя формула (37) выведена в области $\varepsilon \ll E_0$, из непрерывности функции $g(\varepsilon)$ следует, что знак орбитальной части не может измениться и вне указанной области. Поэтому эта формула будет справедлива и для квазиклассических траекторий, удаленных от линии контакта зон. Свойства вектора ν , от которого зависит упомянутый знак, могут быть установлены на основе анализа двухзонного гамильтониана (19) с учетом результатов работы [1]. Эти свойства сводятся к следующим утверждениям. Вектор ν направлен по касательной к линии вырождения зон, определенной без учета спин-орбитального взаимодействия. Он не зависит от выбора базисных функций u_{00} и $u_{0\lambda}$ в точке $\mathbf{k} = 0$ и является в этом смысле инвариантной

характеристикой вырожденных электронных состояний. Он может обращаться в нуль только в точках пересечения (если такие есть) данной линии контакта зон с некоторой другой подобной линией, так что на участках между точками пересечения его ориентация не изменяется. Входящее в (37) скалярное произведение $\mathbf{i}_z \nu$ не равняется нулю для рассматриваемых здесь зацепленных за линию контакта зон траекторий (оно обращается в нуль для орбит типа 2 на рис. 1).

В заключение еще раз остановимся на соотношении результатов, полученных здесь и в предыдущем разделе. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием волновые функции электрона в магнитном поле могут быть представлены как произведения постоянных спиноров s_p на чисто орбитальные волновые функции бесспиновой частицы. Нетрудно понять, что таким состояниям отвечают $\gamma = 0$ и $g = 2$. По существу, это есть просто другая классификация тех электронных состояний в магнитном поле, что получаются в пределе $\Delta \rightarrow 0$. Хотя подобный подход является приближенным при учете спин-орбитального взаимодействия, в области энергий $\epsilon \gg \Delta$ с его помощью можно достаточно хорошо описывать не только энергетический спектр, но и матричные элементы операторов. Лишь при $\epsilon \sim \Delta$ матричные элементы должны рассчитываться в рамках строгого подхода, использованного в этом разделе.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предсказанное в настоящей работе значительное отличие g -фактора от двойки (или изменение γ) должно проявляться в осцилляционных эффектах. Для определенности будем говорить об осцилляциях намагниченности в эффекте де Гааза–ван Альфена. Как известно [14], амплитуда p -й гармоники этой величины пропорциональна множителю

$$\cos \left(\pi p \frac{g}{2} \frac{m^*}{m} \right), \quad (38)$$

который зависит от g -фактора. Подставляя в (38) формулу (5), находим, что для траекторий, зацепленных за линию вырождения зон, знак этого множителя для основной гармоники ($p = 1$) будет противоположным тому, который можно было бы ожидать при $g = 2$. Методы измерения абсолютной величины и знака косинуса (38) описаны в [14]. Из анализа, выполненного в этой монографии, следует, что с экспериментальной точки зрения определение знака множителя (38) наиболее просто осуществляется для малых экстремальных сечений поверхности Ферми. В связи с этим укажем несколько металлов, в которых квазиклассические траектории, отвечающие таким сечениям, зацеплены за линию контакта зон и, кроме того, в которых мало спин-орбитальное взаимодействие. Такими металлами являются, например, бериллий [24], магний [25], графит [26, 27] (последний — полуметалл). В бериллии и магнии, имеющих гексагональную плотноупакованную кристаллическую структуру, линия случайного вырождения второй и третьей зон расположена в базисной плоскости кристалла и проходит внутри неодносвязной дырочной поверхности второй зоны, так называемого «монстра» (Mg) или «короны» (Be). Если магнитное поле лежит в этой же плоскости, то для орбит, отвечающих минимальным сечениям этой поверхности (находящихся на ее перешейках), будет иметь место (5). Отвлекаясь от несущественной здесь открытости «монстра» в определенных направлениях, можно сказать, что в качественном отношении рассматриваемая ситуация подобна изображенной на рис. 1б. Отметим, что в изовалентных

с бериллием и магнием и имеющих ту же кристаллическую структуру цинке и кадмии линия случайного вырождения второй и третьей зон попадает внутрь электронной «линзы» третьей зоны [28] и не зацеплена за квазиклассические траектории (см. рис. 1а). В бериллии, магнии, а также графите на оси третьего порядка (вертикальное ребро HKH их зоны Бриллюэна, представляющей собой гексагональную призму) имеет место закономерное вырождение зон. В случае магнитного поля, направленного по этой оси, соотношение (5) должно выполняться для экстремальной орбиты, охватывающей точку K . В бериллии и магнии эта орбита расположена на так называемой «сигаре» третьей зоны. Необходимо, однако, иметь в виду, что в магнии при такой ориентации поля уже сравнительно небольшая его величина приводит к магнитному пробое между «сигарой» и «монстром», т. е. к нарушению условия (36). Этой трудности нет в графите, поверхность Ферми которого имеет самопересекающийся вид, подобный изображенному на рис. 1в (траектория 4 соответствует интересующей нас орбите в окрестности точки K). Поэтому этот полуметалл, по-видимому, более удобен для экспериментального изучения описанного здесь эффекта в случае закономерного вырождения зон. Отметим, наконец, что для всех упомянутых выше траекторий $m^* \ll m$ и косинус (38) при $p = 1$ близок к минус единице.

Что касается изучения g -фактора с помощью электронного парамагнитного резонанса, то таким способом едва ли возможно различить случаи, когда в металле имеются траектории, зацепленные за линию вырождения зон, и когда таких орбит нет. Действительно, как следует из результатов предыдущего раздела, в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием возбуждение переменным магнитным полем спиновых степеней свободы не будет влиять на орбитальное состояние электрона. Иными словами, резонанс будет наблюдаться на частоте, отвечающей $g = 2$. Только в меру силы спин-орбитального взаимодействия возможно появление резонанса на частотах, соответствующих экстремальным по k_z значениям (37). Однако резонанс на таких частотах возможен в металлах и без линий вырождения зон [29].

В заключение приведем соображения, показывающие, что результаты (4), (5), полученные в одноэлектронном приближении, по-видимому, не изменятся и при учете ферми-жидкостного взаимодействия электронов (не считая хорошо известных перенормировок спиновой части g -фактора и циклотронной массы m^*). Поскольку величина $\delta\gamma$, которую определим как разность значений γ для зацепленной и не зацепленной за линию вырождения зон траекторий, изменяет знак при замене $H \rightarrow -H$ (см. (18)), то уже из условия инвариантности квазиклассического спектра при таком преобразовании поля следует, что величина $2\delta\gamma$ должна быть целым числом. Иными словами, $|\delta\gamma|$ либо 0, либо $1/2$. В то же время $\delta\gamma$ зависит только от электронных состояний на поверхности Ферми, и в духе идей теории ферми-жидкости Ландау следует ожидать, что эта величина может лишь плавно изменяться при «включении» взаимодействия между электронами. Принимая во внимание, что формула (2) остается верной и при учете этого взаимодействия [13], приходим в итоге к сформулированному выше утверждению.

Литература

1. С. Herring, Phys. Rev. 52, 365 (1937) (имеется перевод в книге: Р. Нокс, А. Голд, *Симметрия в твердом теле*, Наука, Москва (1970), с. 253).

2. D. A. Papaconstantopoulos, *Handbook of the Band Structure of Elemental Solids*, Plenum Press, New York (1986).
3. L. Onsager, *Phil. Mag.* **43**, 1006 (1952).
4. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *ЖЭТФ* **29**, 730 (1955).
5. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **32**, 296 (1957); **33**, 387 (1957).
6. Г. Е. Зильберман, *ЖЭТФ* **34**, 748 (1958).
7. М. Я. Азбель, *ЖЭТФ* **39**, 1276 (1960); **46**, 929 (1964).
8. Л. А. Фальковский, *ЖЭТФ* **49**, 609 (1965).
9. L. M. Roth, *Phys. Rev.* **145**, 434 (1966).
10. А. А. Слуцкий, *ЖЭТФ* **53**, 767 (1967).
11. С. С. Недорезов, *ФНТ* **2**, 1047 (1976).
12. Б. М. Горбовицкий, В. И. Перель, *ЖЭТФ* **85**, 1812 (1983).
13. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика. Ч. 2. Теория конденсированного состояния*, Наука, Москва (1978).
14. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, Москва (1986).
15. Б. А. Дубровин, С. П. Новиков, А. Т. Фоменко, *Современная геометрия*, Наука, Москва (1979).
16. L. M. Roth, *J. Phys. Chem. Solids* **23**, 433 (1962).
17. E. I. Blount, *Phys. Rev.* **126**, 1636 (1962).
18. M. H. Cohen and E. I. Blount, *Phil. Mag.* **5**, 115 (1960).
19. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972).
20. E. I. Blount, in *Solid State Physics*, Vol. 13, Academic Press, New York and London (1962), p. 305.
21. J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
22. Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485 (1959).
23. Г. П. Микитик, Ю. В. Шарлай, *ФНТ* **22**, 762 (1996).
24. J. H. Tripp, P. M. Everett, W. L. Cordon, and R. W. Stark, *Phys. Rev.* **180**, 669 (1969).
25. J. C. Kimball, R. W. Stark, and F. M. Mueller, *Phys. Rev.* **162**, 600 (1967).
26. J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, *Phys. Rev.* **109**, 272 (1958).
27. R. O. Dillon, I. L. Spain, and J. W. McClure, *J. Phys. Chem. Sol.* **38**, 635 (1977).
28. R. W. Stark and L. M. Falikov, *Phys. Rev. Lett.* **19**, 795 (1967).
29. М. Я. Азбель, *ФТТ* **4**, 568 (1962).