

ТЕОРИЯ МАГНИТОПРОБОЙНЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АЛЮМИНИЯ С УЧЕТОМ СПИНОВЫХ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ ЭЛЕКТРОНА ПРОВОДИМОСТИ

Н. Х. Усеинов

*Ульяновский государственный университет
432700, Ульяновск, Россия*

Поступила в редакцию 16 августа 1996 г.

Теория магнитного пробоя с учетом спиновых степеней свободы электрона проводимости применена для расчета гальваномагнитных свойств алюминия, система электронных траекторий которого в магнитном поле имеет малые β -орбиты. Получены выражения для магнитосопротивления и холловского сопротивления в случае двумерной магнитопробойной сети траекторий в пределах стохастического движения электронов по большим орбитам и когерентного движения по β -орбитам. Получено качественное согласие с известными экспериментальными данными.

1. ВВЕДЕНИЕ

Известно, что магнитный пробой приводит к изменению характера полевых зависимостей магнитосопротивления металлов [1, 2]. Изучение явления магнитного пробоя в алюминии ($T = 4.2$ К), проведенное в ряде работ [3–8], показало, что при $H \parallel [001]$ в полях больших 20 кГс реализуется узкий магнитопробойный слой открытых траекторий в k -пространстве с $\delta k \approx 4 \cdot 10^{-2}$ ат. ед. и имеет место когерентность с полем пробоя $H_0 \approx 4$ кГс. Однако в этих работах при объяснении магнитопробойных осцилляций и вычислении гальваномагнитных характеристик Al спин электрона проводимости и спин-орбитальное взаимодействие не учитывались.

Недавно был сделан обстоятельный обзор [9] теории магнитного пробоя с учетом спиновых степеней свободы электрона проводимости. Из анализа закона дисперсии в областях аномального сближения траекторий разных зон было показано, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к возникновению вероятности пробоя с переворотом спина, получена основная динамическая характеристика магнитного пробоя — s -матрица четвертого ранга, обобщены основные положения теории когерентного магнитного пробоя, исследован магнитопробойный спектр электронов проводимости. Рассмотрены приложения теории к гальваномагнитным явлениям, эффекту де Гааза–ван Альфена, к парамагнитному резонансу на электронах проводимости.

Что касается алюминия, то ранее в работе [8], посвященной объяснению аномальной магнитопробойных осцилляций намагниченности, из расчета зонной структуры методом псевдопотенциала, включающим спин-орбитальное взаимодействие, были вычислены площади поперечного сечения β -орбит и соответствующие магнитопробойные поля как функции волнового вектора k_z . Отмечалось, что энергетическая щель, через которую в магнитном поле туннелируют электроны, возникает благодаря слабому спин-орбитальному взаимодействию. В другой работе [10] вычислялся g -фактор электронов проводимости на всей поверхности Ферми алюминия, при этом использовалась

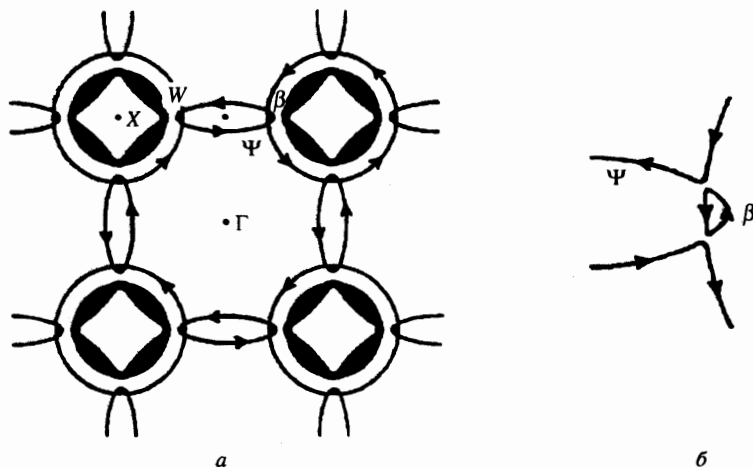


Рис. 1. Поперечные сечения поверхности Ферми Al: *a* — от второй дырочной и третьей электронной зон, *b* — увеличенное изображение ψ - и β -орбит. Сечения от третьей зоны закрашены. Стрелки показывают направления движения электронов

схема четырех ортогонализированных плоских волн с учетом спин-орбитального взаимодействия как возмущения. В [8, 10] сделан вывод, что вычисленные величины с учетом спин-орбитального взаимодействия лучше совпадают с экспериментальными данными по эффекту де Гааза–ван Альфена и спиновому резонансу электронов проводимости.

Более полный список литературы, посвященной исследованию влияния спина электрона проводимости и спин-орбитального взаимодействия на энергетический спектр, гальваномагнитные и другие свойства металлов в условиях магнитного пробоя, см. в обзоре [9].

Таким образом, возникает задача пересмотра теоретической интерпретации полевых зависимостей магнитосопротивления Al с учетом спиновых степеней свободы электрона. Для этого необходимо вычислить тензор проводимости для двумерной системы открытых электронных траекторий (см. рис. 1), возникающих в Al при магнитном пробое, естественным образом учитывающий ориентацию спина электрона в магнитном поле и включающий спин-орбитальное взаимодействие. Это возможно сделать, основываясь на результатах обзора [9] и работы [11], где, в частности, исходя из первоначальных принципов теории магнитного пробоя с учетом спиновых степеней свободы электрона проводимости методом «эффективного пути» (простые примеры этого метода см. в [1, 12]) были вычислены конкретные осциллирующие характеристики реального металла цинка. Но использование метода «эффективного пути» осложняется тем, что каждый раз для конкретного реального металла в зависимости от геометрии поверхности Ферми необходимо разрабатывать свою процедуру вычисления тензора проводимости. Поэтому в данной работе развивается более общий метод, позволяющий унифицировать эту процедуру для произвольной двумерной системы возникающих в условиях магнитного пробоя электронных траекторий, обладающей определенными свойствами симметрии (адекватной топологии поверхности Ферми). Подчеркнем, что вычисления компонент тензора проводимости в этом случае можно проводить независимо для каждой

ориентации спина. Это особенно важно при рассмотрении явлений переноса в случае переходных и ферромагнитных металлов, в которых обменное и спин-орбитальное взаимодействия приводят к сдвигу листов поверхности Ферми с противоположно направленными спинами.

Отметим, что в [9] приводится подробная иллюстрация предлагаемого здесь метода на примере простой модели металла с периодической одномерной сетью электронных траекторий, связанных магнитным пробоем, с учетом спиновых степеней свободы электрона проводимости.

Настоящая работа, по существу, является продолжением и развитием обзора [9] на случай двумерной системы траекторий Al. В разд. 2 на основе теории магнитного пробоя вводятся необходимые определения и величины, помогающие понять процесс вычисления тензора проводимости. Малые β -орбиты заменяются эффективными магнитопробойными узлами (точками). Для их математического описания используются эффективные вероятности пробоя, вычисленные в работе [13], с учетом спина электрона и спин-орбитального взаимодействия. Система электронных траекторий Al при $H \parallel [001]$ заменяется двумерной редуцированной магнитопробойной сетью. В разд. 3 на основе кинетического уравнения Больцмана и теории стохастического магнитного пробоя получается общее выражение для компонент тензора проводимости. В разд. 4 эти компоненты тензора последовательно вычисляются в предположении стохастического характера движения электронов по двумерной редуцированной магнитопробойной сети и когерентного по β -орбитам. В разд. 5 вводятся необходимые параметры расчета, вычисляются компоненты тензора сопротивления и полученные результаты сравниваются с известными ранее теоретическими и экспериментальными данными.

2. МАГНИТОПРОБОЙНАЯ СЕТЬ И ЭФФЕКТИВНЫЕ ВЕРОЯТНОСТИ

Известно [14, 15], что многие свойства металлов в магнитном поле можно описать, используя квазиклассические уравнения. В этом приближении электроны движутся в обратном пространстве по траекториям, возникающим от пересечения поверхности Ферми и плоскости перпендикулярной магнитному полю $H(0, 0, H)$:

$$\varepsilon_{ms}(\mathbf{k}) = \varepsilon_F, \quad k_z = k_{z0} = \text{const}, \quad (1)$$

где $\varepsilon_{ms}(\mathbf{k})$ — закон дисперсии, m — номер зоны, s — спиновый индекс, ε_F — энергия Ферми, \mathbf{k} — волновой вектор. В обзорах [1, 2] было показано, что в условиях магнитного пробоя меняется топология траекторий (1): образуется плоская сеть из участков квазиклассического движения, принадлежащих разным зонам и связанных магнитопробойными узлами. В магнитопробойном узле вероятность туннелирования электрона в соседнюю зону равна $w = \exp(-H_0/H)$, где $H_0 = H_0(\varepsilon_F, k_z)$ — поле пробоя. Возникающая при пробое сеть траекторий называется магнитопробойной конфигурацией или магнитопробойной сетью.

Учет спин-орбитального взаимодействия в теории магнитного пробоя [9] привел к тому, что в одной магнитопробойной сети объединяются участки с разными проекциями электронных спинов. В этом случае вероятность туннелирования равна сумме вероятностей пробоя без переворота спина w^0 и с переворотом спина w^s :

$$w^0 = \frac{w}{1 + \alpha^2}, \quad w^s = \frac{\alpha^2 w}{1 + \alpha^2}, \quad (2)$$

где α — параметр спин-орбитального взаимодействия, который определяется отношением недиагональных по номеру зоны и спиновому индексу матричных элементов оператора скорости электрона вблизи максимального сближения траекторий [9]. Оценка величины α показывает, что при слабом спин-орбитальном взаимодействии $0 \leq \alpha \leq 1$.

Поверхность Ферми Al хорошо известна. Она состоит из замкнутой дырочной поверхности во второй зоне и трех электронных поверхностей в третьей, центрированных соответственно в точках Γ и X зоны Бриллюэна. Третья зона образует замкнутые «четвертные кольца» или «рукава», которые расположены вдоль ребер и соединяются около точек W (см. рис. 1а).

Туннелирование электронов при магнитном пробое происходит между ψ -орбитой второй зоны и β -орбитой третьей зоны, расщепление между которыми, показанное на рис. 1б, возникает благодаря слабому спин-орбитальному взаимодействию [8]. Это приводит к образованию разнообразных замкнутых и открытых орбит с двумя, четырьмя и более магнитопробойными узлами [5]. Увеличенные и открытые орбиты в свою очередь приводят к изменению периода осцилляций и понижению амплитуды эффекта де Гааза–ван Альфена, к сильному изменению гальваномагнитных свойств, которые проявляются в осцилляциях как результат квантовой интерференции электронов проводимости.

Схематическое изображение магнитопробойной сети Al при магнитном поле $H \parallel [001]$ можно получить из рис. 1. Она состоит из большой замкнутой дырочной ψ -орбиты и малых электронных β -орбит. Из рис. 1 видно, что ларморовский период $T_{c\beta}$ движения электрона на β -орбите много меньше времени T_c пребывания электрона на больших участках ψ -орбиты. Существенное различие периодов наблюдается также в других металлах (см., например, [1, 2, 9]).

Такая ситуация позволяет упростить вычисление тензора проводимости, используя теорию стохастического магнитного пробоя [1, 2]. В этой теории предполагается, что малоугловое рассеяние не влияет на фазу волновой функции электрона при движении по малой орбите, а на больших участках траектории оно превращает движение электрона в случайное блуждание. Другими словами, в металле существует два типа движения электронов: в пределах малых орбит движение когерентное, а на больших участках — стохастическое.

В этом случае используют редуцированную магнитопробойную сеть, где малые орбиты заменены эффективными магнитопробойными узлами. Такая редуцированная двумерная магнитопробойная сеть для Al в пределах первой зоны Бриллюэна изображена на рис. 2. Каждый эффективный магнитопробойный узел «переключает» движение электронов по редуцированной магнитопробойной сети. Соответствующие эффективные вероятности пробоя периодически зависят от фазы, набираемой электроном при когерентном движении по малой орбите, что приводит к осцилляциям кинетических коэффициентов с периодом, соответствующим площади малой орбиты [1, 2, 9].

При рассмотрении динамики электрона в Al с учетом спиновых степеней свободы и спин-орбитального взаимодействия мы предположим, что существуют две независимые редуцированные магнитопробойные сети (вложенные одна в другую), на одной из которых электрон движется со спином вверх, а на другой — со спином вниз. В этом случае для каждой редуцированной магнитопробойной сети нам необходимо знать эффективные вероятности пройти малые орбиты или отразиться от них со своим направлением спина. Эти вероятности для симметричной двухугольной орбиты с эквивалентными магнитопробойными узлами были получены в работе [13]. В случае β -орбит с эквива-

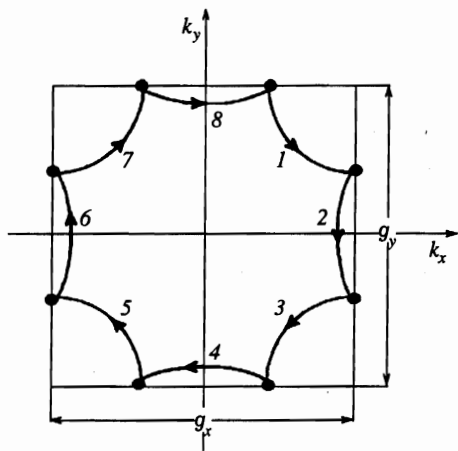


Рис. 2. Редуцированная двумерная магнитопробойная сеть в пределах первой зоны Бриллюэна, соответствующая рис. 1а. Роль эффективных магнитопробойных узлов выполняют точки. Номерами обозначены участки магнитопробойной сети

с эквивалентными магнитопробойными узлами они имеют такой же вид:

$$P^\uparrow = \frac{w^2}{1 + \alpha^2} \left(\frac{1}{|1 - (1 - w) \exp(i\gamma_\beta^\uparrow)|^2} + \frac{\alpha^2}{|1 - (1 - w) \exp(i\gamma_\beta^\downarrow)|^2} \right),$$

$$P^\downarrow = \frac{w^2}{1 + \alpha^2} \left(\frac{\alpha^2}{|1 - (1 - w) \exp(i\gamma_\beta^\uparrow)|^2} + \frac{1}{|1 - (1 - w) \exp(i\gamma_\beta^\downarrow)|^2} \right),$$

$$Q^{\uparrow, \downarrow} = 1 - P^{\uparrow, \downarrow},$$
(3)

где стрелки \uparrow, \downarrow показывают направление спина электрона, подошедшего к эффективно-магнитопробойному узлу (см. рис. 3). Фазы, набираемые электроном на β -орбите, имеют вид

$$\gamma_\beta^{\uparrow, \downarrow} = \frac{c\hbar}{eH} A_\beta(k_z) \pm \pi g^{eff} + 2\Lambda, \tag{4}$$

где $A_\beta(k_z)$ — «бесспиновая» площадь орбиты, g^{eff} является спиновым вкладом в фазу и называется эффективным g -фактором. Он определяется соотношением

$$g^{eff} = \frac{1}{2} g_\beta \frac{m_{c\beta}}{m_0}, \tag{5}$$

где $m_{c\beta}$ и g_β — соответственно циклотронная масса и g -фактор электрона, связанные с β -орбитой, m_0 — масса свободного электрона. Знак плюс в (4) соответствует движению электрона по малой орбите со спином вверх, знак минус — движению со спином вниз (см. рис. 3). Третье слагаемое в (4) определяет скачок фазы волновой функции, когда электрон проходит через магнитопробойный узел, Λ является функцией H и H_0 , которая здесь для нас несущественна, ее точный вид приведен в обзоре [9].

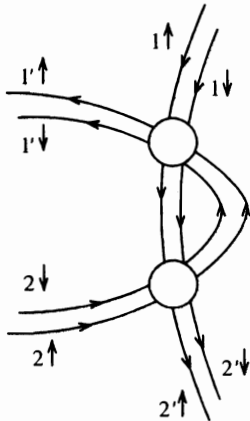


Рис. 3. Эффективный магнитопробойный узел от малой β -орбиты с учетом спиновых степеней свободы электронов, соединяющий большие ψ -орбиты (см. рис. 1). Стрелки показывают направление движений и ориентацию спина электронов

В заключение этого раздела отметим, что введение эффективных вероятностей пробы (3) и сведение магнитопробойной сети к редуцированной со стохастическим характером движения электрона позволяют рассмотреть движения электронов со спином вверх и со спином вниз независимо. Поэтому дальнейший расчет тензора проводимости мы будем проводить для одной редуцированной магнитопробойной сети с определенным направлением спина, при этом спиновый индекс $s = \uparrow, \downarrow$ не будем указывать, но окончательный результат усредним по спину. Кроме того, вместе с термином редуцированная магнитопробойная сеть будем использовать также термин магнитопробойная сеть.

3. СТАТИЧЕСКИЙ ТЕНЗОР ПРОВОДИМОСТИ В УСЛОВИЯХ СТОХАСТИЧЕСКОГО МАГНИТНОГО ПРОБОЯ

Рассмотренный выше стохастический характер движения электрона позволяет вычислить тензор проводимости в квазиклассическом приближении [2]. В этом случае магнитный пробой начинает играть роль стохастического фактора, перемешивая электроны по всем участкам магнитопробойной сети. Роль времени свободного пробега играет время между двумя последовательными магнитопробойными рассеяниями. Оно определяется характерной циклотронной частотой ω_c и соответствующими значениями вероятности магнитного пробега. При этом компоненты тензора проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$ зависят от топологии магнитопробойной сети. В предельных случаях при $H \ll H_0$ или $H \gg H_0$ участки магнитопробойной сети превращаются в обычные открытые или замкнутые траектории. Тогда зависимость $\sigma_{\alpha\beta}$ от поля начинает определять истинное время релаксации импульса τ .

Такому представлению соответствует кинетическое уравнение Больцмана с линеаризованным интегралом столкновений. Его общее решение при условии $\omega_c \tau \gg 1$ можно искать в виде

$$f_m(\mathbf{k}) = f_F(\mathbf{k}) - \frac{\partial f_F}{\partial \epsilon} e \mathbf{E} \Psi_m(\mathbf{k}), \tag{6}$$

где $f_m(\mathbf{k})$ — неравновесная функция распределения, $f_F(\mathbf{k})$ — функция распределения Ферми-Дирака, \mathbf{E} — электрическое поле, $\Psi_m(\mathbf{k})$ — векторная функция распределения

электронов по магнитопробойной сети (аналог матрицы плотности). В электрических и магнитных полях кинетические уравнения Больцмана удобно записать в переменных ε , k_z , t_m . Тогда в низшем порядке по $\Psi_m(\mathbf{k})$ уравнения приобретают вид [14, 15]

$$\frac{\partial \Psi_i}{\partial t_i} + \hat{I}_k \{ \Psi_i \} = v_i, \quad \hat{I}_k \{ \dots \} = \left(\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right)^{-1} \hat{I} \left\{ \frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \dots \right\}, \quad (7)$$

где Ψ_i — значения функций $\Psi_m(\mathbf{k})$ на участках магнитопробойной сети, $i = i(m)$ — номер участка, \hat{I} — линейный интеграл столкновений, v_i — вектор скорости.

Для решения уравнений (7) необходимы граничные условия. Если при данных ε и k_z траектория замкнута, то, очевидно, функция Ψ_i должна периодически зависеть от t_i . Если же траектория открыта, то граничным условием служит условие конечности Ψ_i при $t_i = \pm\infty$. Когда магнитное поле \mathbf{H} параллельно оси z , функция Ψ_i должна быть периодической с периодом обратной решетки. Отличие от квазиклассической ситуации (см. [14]) заключается в том, что в условиях стохастического магнитного пробоя функции Ψ_i различных участков связаны уравнениями [2]

$$\Psi_{i'}(0) = \sum_i w_{i',i} \Psi_i(T_i), \quad (8)$$

где $\Psi_{i'}(0)$ — значения функций $\Psi_{i'}(\mathbf{k})$ на началах участков, выходящих из магнитопробойного узла; $w_{i',i}$ — вероятности магнитного пробоя; $\Psi_i(T_i)$ — значения $\Psi_i(\mathbf{k}(t_i))$ на концах участков, входящих в магнитопробойный узел, T_i — время движения электрона по участку i . Граничные условия (8) показывают, что поток частиц, вышедший из магнитопробойного узла, например на участке $i' = 1'$, собирается из частиц, двигавшихся по входящим участкам $i = 1, 2$ с весами $1 - w$ и w соответственно.

Решение уравнений (7) с граничными условиями (8) позволяет получить компоненты тензора проводимости $\sigma_{\alpha\beta}$, которые выражаются через Ψ_i :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{|h|}{\hbar} \sum_i \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_F}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \int_{-k_0}^{k_0} dk_z \int_0^{T_i} v_i^\alpha(t_i) \Psi_i^\beta(t_i) dt, \quad (9)$$

где $h = eH/c\hbar$, суммирование по i проводится до N — полного числа неэквивалентных участков магнитопробойной сети. Здесь необходимо отметить, что для получения полной проводимости надо еще выполнить суммирование по спину. При низких температурах ($T \approx 4.2$ К) считается, что $(-\partial f_F / \partial \varepsilon)$ в (9) ведет себя как δ -функция аргумента $(\varepsilon - \varepsilon_F)$, что в дальнейшем предполагается. Однако эта замена, вообще говоря, недопустима, так как конечность температуры T сказывается на характерной энергии $k_B T$ электрона, которая может находиться в любом соотношении с $\hbar\omega_\beta$, где ω_β — циклотронная частота электрона на β -орбите. Это обстоятельство мы учтем в конце следующего раздела.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕНЗОРА ПРОВОДИМОСТИ ДВУМЕРНОЙ МАГНИТОПРОБОЙНОЙ СЕТИ АЛЮМИНИЯ

Применим изложенную выше теорию к редуцированной двумерной магнитопробойной сети Al, изображенной на рис. 2. Сначала получим диссипативную компоненту

тензора проводимости σ_{xx} . Для этого необходимо найти зависимость компонент Ψ_i от эффективных вероятностей P, Q и векторов обратной решетки.

Пренебрегая интегралом столкновений в уравнениях (7), для Ψ_x^x и Ψ_x^y получим

$$\begin{aligned} \Psi_i^x(t_i) &= \Psi_i^x(0) - \frac{1}{h} [k_y^i(t_i) - k_y^i(0)], \\ \Psi_i^y(t_i) &= \Psi_i^y(0) + \frac{1}{h} [k_x^i(t_i) - k_x^i(0)]. \end{aligned} \tag{10}$$

Здесь $\Psi_i^x(0), \Psi_i^y(0)$ — значения функции распределения в начале i -го участка, вторые слагаемые следуют из квазиклассических уравнений движения [14].

При $t_i = T_i$ выражения (10) принимают вид

$$\Psi_i^x(T_i) = \Psi_i^x(0) + \frac{\Delta_i^y}{h}, \quad \Psi_i^y(T_i) = \Psi_i^y(0) - \frac{\Delta_i^x}{h}, \tag{11}$$

где Δ_i^x, Δ_i^y представляют собой приращения координат k_x, k_y при прохождении электроном i -го участка.

Отметим, что для магнитопробойных сетей некоторых металлов часто выполняется одно из условий,

$$\sum_i^N \Delta_i^x = g_x \sum_i^N n_i = 0, \quad \sum_i^N \Delta_i^y = g_y \sum_i^N n_i = 0,$$

или эти два условия выполняются одновременно, как в данном случае. Здесь g_x, g_y — компоненты вектора обратной решетки, $n_i = 0$, если i — номер внутреннего участка, и $n_i = \pm 1$, если участок i пересекает границу элементарной ячейки. Очевидно для Al $g_x = g_y = g$.

В рассматриваемом случае (см. рис. 2) приращение координат Δ_i^x, Δ_i^y легко найти, зная координаты начала и конца каждого из восьми участков. Например, x -компоненты (11) четырех участков имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_1^x(T_1) &= \Psi_1^x(0) + \delta, \\ \Psi_2^x(T_2) &= \Psi_2^x(0) + 2\delta, \\ \Psi_3^x(T_3) &= \Psi_3^x(0) + \delta, \\ \Psi_4^x(T_4) &= \Psi_4^x(0), \end{aligned} \tag{12}$$

где обозначение $\delta = g/4h$ введено для упрощения записи. Остальные x, y -компоненты $\Psi_i(T_i)$ легко найти элементарным вычислением или из свойств симметрии магнитопробойной сети (см. рис. 2)

$$\begin{aligned} \Psi_1 + \Psi_5 &= 0, & \Psi_3 + \Psi_7 &= 0, \\ \Psi_2 + \Psi_6 &= 0, & \Psi_4 + \Psi_8 &= 0. \end{aligned} \tag{13}$$

Используя (9) и (7) при $\hat{I} = 0$ для слоя магнитопробойной сети толщиной $2k_{zm}$ с учетом того, что параметры магнитного пробоя и площадь сечения малой β -орбиты A_β

являются функциями k_z , выражение для компоненты σ_{xx} получим в виде

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{|h|}{\hbar} \sum_{i=1}^8 \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z \left\{ [\Psi_i^x(T_i)]^2 - [\Psi_i^x(0)]^2 \right\}. \tag{14}$$

Теперь запишем граничные условия (8) для редуцированной магнитопробойной сети при стохастическом движении электронов по большим участкам:

$$\begin{aligned} \Psi_1(0) &= P\Psi_3(T_3) - Q\Psi_4(T_4), \\ \Psi_2(0) &= Q\Psi_1(T_1) - P\Psi_2(T_2), \\ \Psi_3(0) &= Q\Psi_2(T_2) - P\Psi_1(T_1), \\ \Psi_4(0) &= Q\Psi_3(T_3) - P\Psi_4(T_4). \end{aligned} \tag{15}$$

Для получения этих соотношений мы использовали периодическую эквивалентность участков магнитопробойной сети и свойства симметрии (13). Кроме того, эти свойства позволяют сократить число слагаемых в сумме по i в выражении (14). Подставляя (15), а затем (12) в (14), с учетом того, что $P+Q = 1$, получим для σ_{xx} выражение в терминах $\Psi_i^x(0) \equiv \Psi_i^x$:

$$\sigma_{xx} = 2 \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{|h|}{\hbar} \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z QP \left[(\Psi_1^x + \Psi_2^x + 3\delta)^2 + (\Psi_3^x + \Psi_4^x + 3\delta)^2 \right]. \tag{16}$$

Для определения неизвестных величин Ψ_i^x ($i = 1, 2, 3, 4$) надо в граничные условия (15) вместо $\Psi_i^x(T_i)$ подставить значения функций (12) и решить систему четырех уравнений. Определитель этой системы зависит от эффективных вероятностей следующим образом: $\Delta = Q^2 + 4P^2$, а функции распределения в начале 1, 2, 3, 4 участков имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_1^x &= 2 \frac{\delta}{\Delta} Q(3P - 1), \\ \Psi_2^x &= 4 \frac{\delta}{\Delta} PQ - \delta, \\ \Psi_3^x &= 4 \frac{\delta}{\Delta} P(1 - 3P) + \delta, \\ \Psi_4^x &= 2 \frac{\delta}{\Delta} Q^2. \end{aligned} \tag{17}$$

Подставляя (17) в (16), приходим к выражению

$$\sigma_{xx} = \frac{ec}{H} \frac{g^2}{(2\pi)^3} \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z \frac{2QP}{Q^2 + 4P^2}. \tag{18}$$

Теперь получим холловскую компоненту тензора проводимости. В терминах неизвестных функций распределения $\Psi_i^x(t_i)$, $\Psi_i^y(t_i)$ она имеет вид

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{|h|}{\hbar} \sum_{i=1}^8 \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z \int_0^{T_i} \frac{\partial \Psi_i^y(t_i)}{\partial t_i} \Psi_i^x(t_i) dt_i. \tag{19}$$

Подставляя выражения (10) в (19), получаем

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \frac{|h|}{\hbar} \sum_{i=1}^8 \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z \left[(\Psi_i^y(T_i) - \Psi_i^y) \left(\Psi_i^x + \frac{k_y^i(0)}{h} \right) - \frac{1}{h^2} \int_{(\varepsilon, k_z)} k_y^i dk_x^i \right], \quad (20)$$

где $k_y^i(0)$ — координата волнового вектора в начале i -го участка, а второе слагаемое в квадратных скобках определяет площадь поперечного сечения поверхности Ферми, см. формулу (1).

Для вычисления первого слагаемого в (20) необходимо знать приращение Δ_x^i координат k_x при прохождении электроном i -го участка. Аналогично тому как были найдены уравнения (12), для y -компоненты функции распределения получаем

$$\begin{aligned} \Psi_1^y(T_1) &= \Psi_1^y(0) + \delta, \\ \Psi_2^y(T_2) &= \Psi_2^y(0), \\ \Psi_3^y(T_3) &= \Psi_3^y(0) - \delta, \\ \Psi_4^y(T_4) &= \Psi_4^y(0) - 2\delta. \end{aligned} \quad (21)$$

Используя (13), подставляя (21) и (17) в (20) и выражая отношения $k_y^i(0)/h$ через δ (см. рис. 2) для холловской компоненты получаем

$$\sigma_{yx} = \frac{ec}{H} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-k_{z,m}}^{k_{z,m}} dk_z \left[\frac{4g^2 P^2}{Q^2 + 4P^2} + A(\varepsilon, k_z) \right]. \quad (22)$$

Здесь $A(\varepsilon, k_z)$ — площадь поперечного сечения ψ -орбиты с учетом знака, определяемый знаком эффективной массы. Для ψ -орбиты Al эффективная масса отрицательна, $m_{c\psi} < 0$, поэтому в квадратных скобках (22) стоит знак плюс.

Отметим, что если начать вычисление с холловской компоненты σ_{xy} , то нам необходимо было бы вычислять y -компоненты функции распределения Ψ_i^y в начале участков $i = 1, 2, 3, 4$, подставляя (21) в граничные условия (15). Однако в этом нет необходимости, поскольку $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$. Это утверждение доказывается непосредственным вычислением, а также следует из соотношений Онзагера [15]. Из результата вычисления Ψ_i^y и из симметрии магнитопробойной сети (см. рис. 2) следует

$$\begin{aligned} \Psi_1^x &= -\Psi_3^y, & \Psi_3^x &= \Psi_1^y, \\ \Psi_2^x &= -\Psi_4^y, & \Psi_4^x &= \Psi_2^y. \end{aligned} \quad (23)$$

Чтобы сравнить полученный результат с данными для реальной ситуации в Al, необходимо несколько модифицировать выражения (18) и (22). Во-первых, учтем вклад в σ_{xx} , σ_{yx} соответствующих проводимостей, возникающих от электронов, не участвующих в магнитном пробое, т. е. от электронов, движущихся по замкнутым траекториям. Как известно [14], для некомпенсированных металлов компоненты тензора проводимости при $\omega_c \tau \gg 1$ определяются формулами $\sigma_{xx} \sim a/H^2$ и $\sigma_{yx} \sim 1/RH$, где a — некоторая константа, R — коэффициент Холла. Во-вторых, учтем температурный множитель $A(T) = X/\text{sh } X$, где $X = 147.0 m_{c\beta} T / m_0 H$ — известное выражение (см., например, [12]). Множитель $A(T)$ (см. замечание после формулы (9)) всегда присутствует в

общих выражениях для σ_{xx} , σ_{yx} и следует из последовательной квантовой теории при выводе осциллирующих частей кинетических коэффициентов [2]. В-третьих, (18) и (22) умножим на 2 (множитель 2 учитывается при обычном выводе σ_{xx} , σ_{yx}) для рассмотрения случая теории магнитного пробоя в Al в пренебрежении спиновыми степенями свободы электрона проводимости. Наконец, предполагая, что концентрация электронов, находящихся на ψ -орбите, в пределах узкого магнитопробойного слоя не зависит от k_z (второе слагаемое в (22)), окончательно получаем

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{A(T)b}{Hk_{zm}} \int_0^{k_{zm}} \frac{2QP}{Q^2 + 4P^2} dk_z + \frac{a}{H^2}, \quad (24)$$

$$\sigma_{yx} = -\sigma_{xy} = \frac{A(T)b}{Hk_{zm}} \int_0^{k_{zm}} \frac{4P^2}{Q^2 + 4P^2} dk_z + \frac{1}{RH}, \quad (25)$$

где $b = 4g^2k_{zm}ec/(2\pi)^3$ характеризует возникающий при магнитном пробое дисбаланс электронов и дырок в слое $2k_{zm}$. Подчеркнем, что второе слагаемое в (25) включает в себя не только проводимость, возникающую от замкнутой ψ -орбиты в пределах магнитопробойного слоя, но и проводимость от замкнутых орбит остальной поверхности Ферми.

Таким образом, формулы (24), (25) могут быть непосредственно использованы при $g_\beta = 0$ и $\alpha = 0$ для вычисления полевых зависимостей компонент тензора проводимости Al в условиях магнитного пробоя без учета спина электрона и спин-орбитального взаимодействия. При $g_\beta \neq 0$ и $\alpha \neq 0$ с самого начала весь расчет σ_{xx} , σ_{yx} можно было выполнить, снабдив Q и P спиновым индексом. При этом магнитопробойные слагаемые в (24), (25) должны быть вдвое меньше.

5. МАГНИТОПРОБОЙНЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АЛЮМИНИЯ

В этом разделе мы получим теоретические зависимости гальваномагнитных характеристик Al для обоснования справедливости формул (24), (25), используя теоретические и экспериментальные данные, полученные ранее в работах [3–8, 16–18]. Проведем сравнение теоретической зависимости магнитосопротивления с экспериментальной кривой [4], а также обсудим влияние спиновых степеней свободы электрона проводимости на период и амплитуду магнитопробойных осцилляций.

Подставляя в (24) и (25) эффективные вероятности (3) с каждым направлением спина и усредняя, получим полные проводимости с учетом спина электрона и спин-орбитального взаимодействия:

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{2} (\sigma_{xx}^\uparrow + \sigma_{xx}^\downarrow), \quad \sigma_{yx} = \frac{1}{2} (\sigma_{yx}^\uparrow + \sigma_{yx}^\downarrow). \quad (26)$$

Для вычисления интегралов в (24), (25) в пределах магнитопробойного слоя найдем функции $H_0(k_z)$ и $A_\beta(k_z)$, воспользовавшись результатами работ [3, 8]. В [3] были вычислены сечения поверхности Ферми Al вдоль k_z около точек W (см. рис. 1) без учета

спин-орбитального взаимодействия и приведены графики зависимостей площади поперечного сечения β -орбиты и ширины межзонной щели от k_z . Последнее позволяет определить поле пробоя в различных сечениях вдоль k_z .

Учет спин-орбитального взаимодействия в местах пробоя, как следует из общей теории магнитного пробоя с переворотом спина [9], приводит к перенормировке поля пробоя: $H_0 = H_0^0 / (1 + \alpha^2)^{1/2}$, где H_0^0 — поле пробоя без учета спин-орбитального взаимодействия ($\alpha = 0$). Однако мы не будем использовать эту перенормировку для H_0 в вычислениях (26), а воспользуемся результатами работы [8], где из расчета зонной структуры Al с учетом спин-орбитального взаимодействия были получены зависимости $H_0(k_z)$ и $A_\beta(k_z)$ от k_z вдоль [001].

Разложим поле пробоя $H_0(k_z)$ и площадь поперечного сечения $A_\beta(k_z)$ в низшем порядке по k_z :

$$H_0(k_z) = H_0(0) + \frac{1}{2} H_0'' k_z^2, \quad (27)$$

$$A_\beta(k_z) = A_\beta(0) + \frac{1}{2} A_0'' k_z^2, \quad (28)$$

где $H_0(0)$, $A_\beta(0)$ — экстремальные значения при $k_z = 0$, H_0'' , A'' — вторые производные по k_z , вычисленные при $k_z = 0$. Назовем H_0'' и A'' , соответственно, параметром изменения поля пробоя и параметром кривизны β -орбиты вдоль k_z . Подгонка зависимостей (27) и (28) при полуширине магнитопробойного слоя $k_{zm} \approx (1.3-2.0) \cdot 10^{-2}$ ат. ед. под данные работ [3, 8] приводит к $H_0'' \approx 4.64 \cdot 10^6$ кГс/(ат.ед.)² и $A'' \approx -(0.37-0.17)$.

Теперь определим значения параметров a , b и R в (24) и (25). Начнем с коэффициента Холла R . Значение величины R взято из работы [16], в которой показана его зависимость от магнитного поля при $T = 4.2$ К. При $H > 5$ кГс значение R приближается к $10.2 \cdot 10^{-10}$ Ом·см/кГс и совпадает с результатами других исследователей (см., например, [3]). Через коэффициент Холла можно определить параметры b и a . Из [17] следует, что в сильных полях при $\omega_c \tau \gg 1$ коэффициент Холла Al асимптотически стремится к $3/ecn_{eff}$, где n_{eff} — эффективное число носителей на элементарную ячейку. Предположим, что это — число электронов, участвующих в пробое в слое $2k_{zm}$. С другой стороны, из определения b (см. выше) следует, что $b = ecn_{eff}$. Сравнив эффективные плотности электронов, получаем $b = 3/R$.

Для определения параметра a и проверки справедливости выражений (24), (25) найдем компоненты тензора сопротивления, которые, как известно [14], определяются формулами

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yx}^2}, \quad \rho_{yx} = \frac{\sigma_{yx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yx}^2}. \quad (29)$$

Подставив в ρ_{xx} проводимости от замкнутых орбит (вторые слагаемые в (24) и (25)) и пренебрегая при $H > H_0$ малостью $(aR/H)^2$, получаем $\rho_{xx} \sim aR^2$. В [4] показана левая зависимость магнитосопротивления, соответствующая случаю замкнутых орбит, которая в полях до 60 кГс остается постоянной с $\rho_{xx} \sim 3.5\rho_0$, где ρ_0 — сопротивление при $H = 0$. При $T = 4.2$ К $\rho_0 \approx 1 \cdot 10^{-10}$ Ом·см, что, как указано в работах [3, 4], хорошо согласуется с известными расчетами. Сравнивая результаты для ρ_{xx} , получаем $a \approx 3.5\rho_0/R^2$.

Таким образом, технология вычисления гальваномагнитных характеристик Al в условиях магнитного пробоя с учетом спиновых степеней свободы электрона проводи-

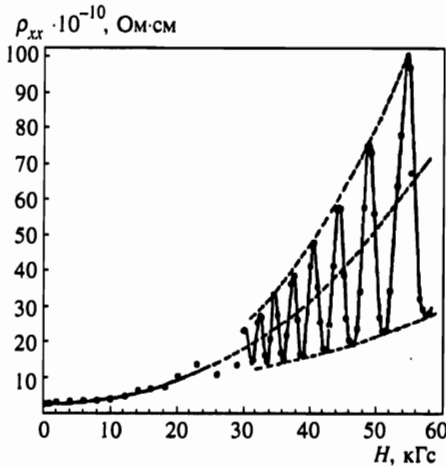


Рис. 4. Экспериментальная осциллирующая зависимость магнитосопротивления ρ_{xx} при $T = 4.2$ К и токе $\mathbf{j} \perp \mathbf{H}$, $\mathbf{H} \parallel [001]$ [4]

мости свелась к численному моделированию теоретических зависимостей (29) от магнитного поля и к нахождению микроскопических параметров модели. Для их уточнения использовалась экспериментальная кривая, взятая из [4] (см. рис. 4).

Такое вычисление было проведено для температуры $T = 4.2$ К и циклотронной массы $m_{c\beta} = 0.102m_0$ электрона на β -орбите [2, 6] с использованием известных значений параметров (см. таблицу).

| Параметры расчета | Литературные данные | Теоретические кривые | |
|--|---------------------|----------------------|-------------|
| | | Рис. 5 | Рис. 6 |
| $a \cdot 10^{10}$, кГс ² /Ом·см | 0.034 | 0.034 | 0.034 |
| $b \cdot 10^{10}$, кГс ² /Ом·см | 0.29 | 0.14 | 0.16 |
| $R \cdot 10^{-10}$, Ом·см/кГс | 10.2 [3, 16, 17] | 10.2 | 10.2 |
| $H_0(0)$, кГс | 3.6–4.0 [2, 8] | 3.6 | 3.6 |
| $H_0'' \cdot 10^6$, кГс/(ат.ед.) ² | ≈ 4.8 [8] | 2.16 | 4.88 |
| $A_\beta(0) \cdot 10^{-3}$, (ат.ед.) ² | 1.24 [3, 7, 8] | 1.24 | 0.65 |
| A'' | ≈ -3.3 [8] | -1.74 | -1.23 |
| $k_{zm} \cdot 10^{-2}$, ат.ед. | 2.0 [4, 8] | 2.0 | 2.0 |
| g^{eff} | — | 0 | 0.49 |
| α | — | 0 | ≈ 0 |

Компьютерная подгонка магнитосопротивления ρ_{xx} (см. рис. 5а) под экспериментальную (рис. 4) была проведена в широких диапазонах значений микроскопических параметров и осуществлялась методом наименьших квадратов, при этом для отыскания оптимальных значений параметров использовался симплекс-метод. Для численного интегрирования (24), (25) использовался метод Симпсона. Относительная ошибка не превышала 1%, при этом число слоев интервала $0 < k_z < k_{zm}$ доходило до 400.

На рис. 5 представлены зависимости магнитопробойных осцилляций магнитосопротивления ρ_{xx} и холловского сопротивления ρ_{yx} при $g^{eff} = 0$ и $\alpha = 0$. Из рис. 5а видно, что полевая зависимость ρ_{xx} качественно совпадает с экспериментальной кривой (см. рис. 4), при этом значения параметров количественно согласуются с литера-

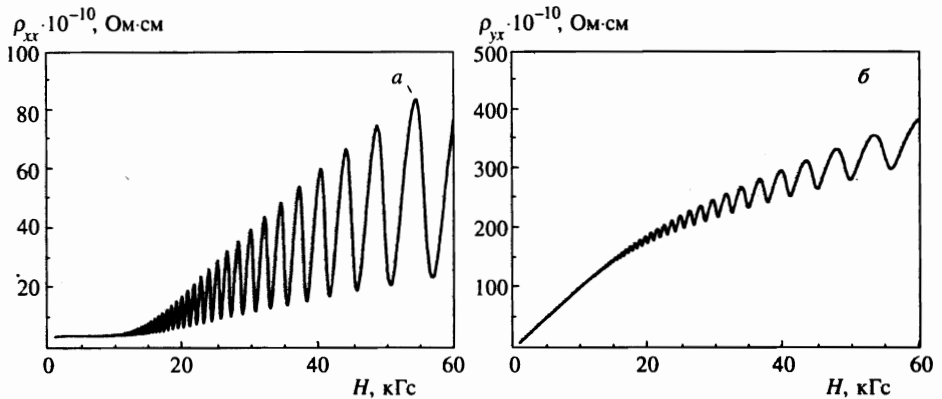


Рис. 5. Теоретические зависимости магнитопробойных осцилляций в Al при $T = 4.2$ К, $H \parallel [001]$: *a* — магнитосопротивление $\rho_{xx} = \rho_{yy}$, *б* — холловское сопротивление $\rho_{yx} = -\rho_{xy}$. Параметры, при которых получены кривые, приведены в таблице

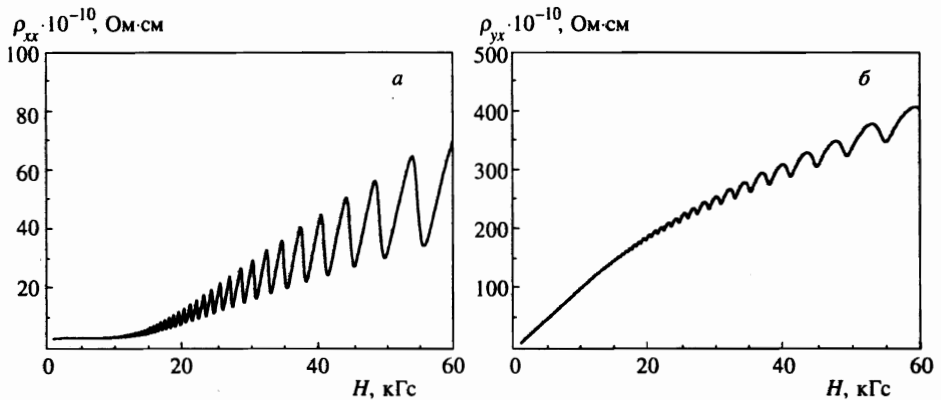


Рис. 6. Теоретические зависимости магнитопробойных осцилляций в Al при $T = 4.2$ К, $H \parallel [001]$, соответствующие рис. 5, но полученные с учетом спиновых степеней свободы электрона, расчетные параметры приведены в таблице

турными данными (см. таблицу), что говорит в пользу принятой модели. Наиболее существенное влияние на амплитуду и форму осцилляций ρ_{xx} оказывают значения параметров H_0'' , A'' . Например, при $H_0'' = 0$ экспоненциального роста амплитуд осцилляций не происходит, кривая ρ_{xx} , осциллируя, выходит на насыщение ниже значения $20 \cdot 10^{-10}$ Ом·см. При $A'' = 0$ форма пиков осцилляций несимметрична.

На рис. 6 показаны соответствующие рис. 5 осциллирующие зависимости ρ_{xx} и ρ_{yx} при $g^{eff} = 0.49$ и $\alpha \approx 0$. Из рис. 6*a* видно, что в этом случае также имеется качественное совпадение с экспериментальной кривой, но амплитуды осцилляций несколько меньше, чем на рис. 5*a*. Если величина α лежит в пределах $0 < \alpha \leq 1$, то характер осцилляций ρ_{xx} менее симметричен, но средние значения осцилляций сдвигаются вверх, приближаясь к средним значениям экспериментальной кривой. Для того чтобы периоды осцилляций ρ_{xx} на рис. 6*a* и 4 совпадали, необходимо положить значение экс-

тремальной площади поперечного сечения $A_{\beta}(0)$ в двое меньше. Если при $g^{eff} = 0.49$ оставить $A_{\beta}(0) = 1.24 \cdot 10^{-3}$ (ат.ед.)², что соответствует обычно наблюдаемому периоду $\Delta(1/H) = 2.15 \cdot 10^{-6}$ Гс⁻¹, то число пиков ρ_{xx} и ρ_{yx} удвоится. Таким образом, учет g -фактора электрона проводимости на β -орбите должен привести к другой величине экстремальной площади $A_{\beta}(0)$ при условии, что справедливо разложение (28).

Можно предположить, что в эксперименте наблюдается удвоенная структура пиков осцилляций, возникающая за счет снятия магнитным полем двукратного спинового вырождения уровней Ландау. В этом можно убедиться при более внимательном рассмотрении экспериментальной кривой (рис. 4). Амплитуды двух последовательных пиков осцилляций немного отличаются. Кроме того, отметим, что возможна ситуация, когда спиновое расщепление точно равно расстоянию между уровнями Ландау. Это приблизительно так для энергетических зон, в которых $m_c/m_0 \ll 1$ [12].

Из полученного значения g^{eff} (см. таблицу), зная величину циклотронной массы $m_{c\beta} = 0.102m_0$, можно оценить значение g -фактора электрона на β -орбите: $g_{\beta} \approx 9.8$. Однако здесь остается еще некоторая неопределенность, поскольку спиновый вклад в фазу (4) находится с точностью до $2\pi n$, где n — целое число.

Влияние температуры сказывается на монотонной части и характере осцилляций ρ_{xx} ниже 30 кГс. При $T < 4.2$ К интенсивность осцилляций возрастает и средний ход зависимости ρ_{xx} от поля становится линейным. При температурах выше 4.2 К осциллирующая составляющая становится малой, что совпадает с результатами температурных исследований [4]. Таким образом, сравнение теоретических полевых зависимостей ρ_{xx} на рис. 5а, 6а с экспериментальной кривой оправдывает введение температурного множителя $A(T)$ в нашей модели.

Качественное совпадение с экспериментом имеет также вычисленный эффект Холла при $\mathbf{H} \parallel [001]$, показанный на рис. 5б и 6б. В обоих случаях холловское сопротивление ρ_{yx} слабо осциллирует относительно величины пропорциональной полю, однако с учетом $g^{eff} \neq 0$ при $0 < \alpha \leq 1$, как видно из рис. 6б, средний ход зависимости ρ_{yx} от магнитного поля более линеен, что лучше согласуется с результатами работ [3, 18].

Таким образом, приведенные графики показывают, что последовательная теория магнитного пробоя с учетом спина электрона проводимости и спин-орбитального взаимодействия и представленный здесь более общий метод вычисления тензора проводимости для двумерной системы электронных траекторий А1 также хорошо объясняют не только характер поведения экспериментальных кривых [3–5, 7], но и дают удивительное для таких сложных осциллирующих функций (25), (26) качественное согласие с экспериментом. Приведенные факты свидетельствуют в пользу того, что при наблюдении магнитопробойных осцилляций кинетических и термодинамических свойств А1 спиновые степени свободы электрона и спин-орбитальное взаимодействие существенно влияют на характер зависимостей от магнитного поля.

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить Б. И. Кочелаева и Ю. Н. Прошина за внимание к работе и за предоставление возможности пройти научную стажировку на кафедре теоретической физики Казанского университета.

Литература

1. R. W. Stark and L. M. Falicov, *Progr. Low Temp. Phys.* **5**, 235 (1967).
2. М. И. Каганов, А. А. Слуцкий, в сб. *Электроны проводимости*, Наука, Москва (1985), с. 101.
Н. Е. Алексеевский, В. И. Нижанковский, там же, с. 197.
3. R. J. Valcombe and R. A. Parker, *Phil. Mag.* **21**, 533 (1970).
4. В. Н. Моргун, В. И. Хоркевич, Н. Н. Чеботаев, В. А. Бондарь, *ФНТ* **2**, 1301 (1976).
5. W. Kesternich and C. Papastaikoudis, *J. Phys. F: Metal Phys.* **7**, 837 (1977).
6. В. И. Гостищев, М. А. Глиньский, А. А. Дрозд, С. Е. Демьянов, *ЖЭТФ* **74**, 1102 (1978).
7. H. Hosoda, Y. Ueda, and T. Kino, *J. Phys. Soc. Jap.* **56**, 2858 (1987).
8. G. G. Lonzarich and P. M. Holtham, *Proc. R. Soc. Lond. A* **400**, 145 (1985).
9. Ю. Н. Прошин, Н. Х. Усеинов, *УФН* **165**, 41 (1995).
10. F. Veuneu, *J. Phys. F: Metal Phys.* **10**, 2875 (1980).
11. Ю. Н. Прошин, Н. Х. Усеинов, *ЖЭТФ* **100**, 1088 (1991).
12. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, Мир, Москва (1986).
13. Yu. N. Proshin and N. H. Useinov, *Phys. Stat. Sol. (b)* **166**, 173 (1991).
14. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
15. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
16. R. D. Barnard and A. E. E. Abdel Rahiem, *J. Phys. F: Metal Phys.* **10**, 2739 (1980).
17. R. Lück, *Phys. Stat. Sol.* **18**, 49 (1966).
18. J. Feder and J. Lothe, *Phil. Mag.* **12**, 107 (1965).