УДК 621.315.592

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ТОЧЕК ЗОННОГО СПЕКТРА ПО КОНЦЕНТРАЦИОННЫМ И ТЕМПЕРАТУРНЫМ ЗАВИСИМОСТЯМ МАГНИТНОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ В СЛАБОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

О. Е. Квятковский

Рассматривается поведение магнитной восприимчивости (МВ) в слабом магнитном поле как функции концентрации носителей тока и температуры $\chi(n, T)$ в окрестности невырожденных критических точек зонного спектра. Показана принципиальная возможность по результатам измерений $\chi(n, T)$ установить наличие критических точек зонного спектра, их положение в шкале концентраций носителей тока, а при определенных условиях и их тип. Найдено, что в невырожденной критической точке в глубине зоны $\chi(n, T=0)$ имеет особенность того же типа, что и особенность Ван Хова плотности состояний, рассматриваемой как функция энергии. Показано, что в низкотемпературном разложении вклада зонных электронов в МВ $\tilde{\chi}_b$ коэффициент при T^2 пропорционален второй производной $\tilde{\chi}_b$ по концентрации носителей тока на уровне Ферми при $T=0$, что позволяет при определенных ограничениях на концентрационные и температурные зависимости остальных вкладов в МВ установить наличие особенностей Ван Хова по дискретному набору экспериментальных точек $\chi(n_i, T=0)$. Показано, что изучение температурных зависимостей МВ при $T > T_f$ также позволяет судить о наличии критических точек спектра в глубине зоны, а в некоторых случаях, в частности в рассмотренной ситуации с двумя близкими критическими точками, позволяет однозначно установить тип критической точки.

При прохождении уровня Ферми через критические точки зонного спектра (точки экстремумов и седловые точки) происходит качественная перестройка энергетического спектра носителей тока вблизи уровня Ферми. Изменение топологии поверхности Ферми приводит к сингулярному поведению плотности состояний в критических точках — особенностям Ван Хова [1] — и, как следствие, к сингулярному поведению термодинамических величин и кинетических коэффициентов при $T=0$ [2]. Согласно классификации Эренфеста, такие топологические переходы можно рассматривать как фазовые переходы $2^1/_2$ рода [2].

В большинстве работ, посвященных изучению топологических переходов, начиная с работы [2], рассматриваются металлы, в которых имеются критические точки, близкие к поверхности Ферми. Для их выявления используется деформация кристалла, как это предлагалось в [2], или исследуются металлические сплавы переменного состава [3, 4].

В то же время имеются материалы, например полупроводниковые соединения $A^{IV}B^{VI}$, многие оксиды со структурой типа перовскита и ряд других соединений, в которых с помощью легирования (или самолегирования) можно в широких пределах изменять концентрацию невымораживающихся при $T=0$ зонных носителей тока. Из расчетов зонной структуры известно, что в таких материалах могут быть критические точки, близкие к краям зон, например в соединениях $A^{IV}B^{VI}$ имеется несколько критических точек вблизи края валентной зоны, которые в принципе могут наблюдаться в области достижимых концентраций носителей тока [5].

В данной работе предлагается метод определения невырожденных критических точек зонного спектра в немагнитных материалах по результатам измерений зависимостей магнитной восприимчивости (МВ) в слабом магнитном поле от концентрации носителей тока n и температуры. Полная МВ состоит из нескольких вкладов, имеющих разные концентрационную и температурную зависимости [1]

$$\chi = \chi_i + \tilde{\chi}_b + \chi_d,$$

где χ_i — вклад голых ионных остовов, $\tilde{\chi}_b$ — вклад зонных электронов, χ_d — вклад дефектов решетки и примесных атомов. Вклад ионных остовов χ_i является фактически постоянной величиной. МВ дефектов и примесей χ_d может в общем случае сложным образом зависеть от концентрации носителей тока и температуры. Если, однако, ограничиться механизмами легирования такими, что легирующие примесные атомы или дефекты решетки являются полностью ионизованными при $T=0$, и областью температур, в которой состояние и концентрация дефектов решетки и примесных атомов не изменяются, то χ_d в этих условиях не зависит от температуры. Если при этом ограничиться типичными для рассматриваемых материалов концентрациями легирующих примесных атомов или дефектов решетки n_d, не превышающими нескольких атомных процентов, то χ_d является линейной функцией n_d и соответственно связана линейной зависимостью с концентрацией носителей тока n. При выполнении сформулированных выше условий температурная зависимость и особенности в концентрационной зависимости МВ полностью определяются поведением зонного вклада $\tilde{\chi}_b$.

Предлагаемый метод основан на совпадении особых точек плотности состояний $\nu(n)$ и зонного вклада в МВ $\tilde{\chi}_b(n, T=0)$, а также на совпадении типов особенностей этих величин в критических точках спектра, за исключением, возможно, точек вырождения спектра.

Имеется много работ, посвященных расчету концентрационных и температурных зависимостей $\tilde{\chi}_b$ в узкощельных материалах по известному энергетическому спектру вблизи краев зон (см., например, [6-9]). Существенное отличие данной работы в том, что в ней фактически рассматривается обратная задача о возможности получения определенной информации о спектре носителей тока по экспериментальным данным для МВ, что позволяет изучать критические точки спектра в глубине зоны.

В работе рассмотрены концентрационные и температурные зависимости различных вкладов в МВ и поведение $\chi(n, T)$ в окрестности критических точек зонного спектра. Показано, что имеется принципиальная возможность однозначно установить наличие особенностей $\chi(n, T=0)$, соответствующих критическим точкам спектра, по экспериментальным данным для $\chi(n, T=0)$ и зависимостям $\chi(n, T)$ в области низких температур, а также установить принадлежность критической точки к одной из двух групп (минимум или седловая точка 2-го типа или максимум и седловая тока 1-го типа). Рассматривается также влияние критических точек в глубине зоны на высокотемпературную зависимость МВ от температуры.

1. Концентрационные зависимости МВ в окрестности критических точек зонного спектра

Как было отмечено выше вопрос об особенностях концентрационных зависимостей МВ сводится к изучению концентрационной зависимости вклада зонных электронов $\tilde{\chi}_b$. Точное микроскопическое выражение для МВ системы невзаимодействующих блоховских электронов кристалла получено в работах [10-12]. Согласно [12],

$$\tilde{\chi}_b = \chi_b + \chi_c,$$

[1] МВ кристалла является тензором 2-го ранга. Для целей настоящей работы достаточно изучения величины $\chi = 1/3 \operatorname{Sp} \hat{\chi}$, т. е. фактически МВ поликристаллов.

где χ_c — вклад носителей тока, χ_b — вклад прямых межзонных переходов из заполненных состояний. В отсутствие носителей тока χ_b является вкладом заполненных валентных зон и вместе с χ_i составляет так называемый решеточный вклад в МВ. В дальнейшем решеточный вклад будет считаться выделенным в отдельное слагаемое и под χ_b будет подразумеваться вклад межзонных переходов из состояний, занятых носителями тока (со знаком минус для дырок).

Различие между χ_b и χ_c состоит в том, что χ_b является линейным функционалом от равновесной функции распределения носителей тока, а χ_c — линейным функционалом от ее производной по энергии, т. е. при $T=0$ в χ_c дают вклад только электроны с поверхности Ферми

$$\chi_b=\frac{1}{V}\sum_{\lambda\mathbf{k}}A_{\lambda\mathbf{k}}f(E_{\lambda\mathbf{k}}-\mu),\qquad \chi_c=\frac{1}{V}\sum_{\lambda\mathbf{k}}B_{\lambda\mathbf{k}}\frac{\partial}{\partial\mu}f(E_{\lambda\mathbf{k}}-\mu), \tag{1}$$

где μ — химический потенциал, $E_{\lambda\mathbf{k}}$ — энергия одночастичных блоховских состояний $|\lambda\mathbf{k}\rangle$,

$$f(E-\mu)=[\exp((E-\mu)/T)+1]^{-1} \tag{2}$$

— функция Ферми—Дирака; $A_{\lambda\mathbf{k}}$, $B_{\lambda\mathbf{k}}$ — коэффициенты, определяемые зонной структурой кристалла [12].

Вклад носителей тока χ_c является суммой орбитального вклада Ландау—Пайерлса (LP) и парамагнитного эффективного спинового (ES) вклада, обобщающего паулиевский спиновый парамагнетизм на случай кристаллов [12]

$$\chi_c=\chi_{LP}+\chi_{ES},$$

где

$$\chi_{LP}=-\frac{e^2\hbar^2}{6m_0^2c^2}\sum_{\lambda}2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}F(\lambda\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial\mu}f(E_{\lambda\mathbf{k}}-\mu),$$

$$F(\lambda\mathbf{k})=\frac{m_0^2}{6\hbar^4}\left[\left(\sum_{\alpha}Q_{\alpha\alpha}\right)^2-\sum_{\alpha,\beta}Q_{\alpha\beta}^2\right],\qquad Q_{\alpha\beta}=\frac{\partial^2}{\partial k_\alpha\partial k_\beta}E_{\lambda\mathbf{k}}, \tag{3}$$

$$\chi_{ES}=\frac{e^2\hbar^2}{8m_0^2c^2}\sum_{\lambda}2\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}g^2(\lambda\mathbf{k})\frac{\partial}{\partial\mu}f(E_{\lambda\mathbf{k}}-\mu),$$

$$g^2=(g_1^2+g_2^2+g_3^2)/3, \tag{4}$$

m_0 — масса свободного электрона; g_1, g_2, g_3 — главные значения эффективного g-фактора, определяющего спиновое расщепление уровней в магнитном поле [12, 13].

Рассмотрим вклад в χ_c от окрестности невырожденной критической точки, расположенной в точке (λ_0, $\mathbf{k}_0$). В общем случае может быть несколько эквивалентных критических точек для звезды вектора $\mathbf{k}_0$. В дальнейшем в таких случаях будет говориться об одной критической точке и подразумеваться суммирование по всем неэквивалентным точкам $\mathbf{k}_0$. В области параболичности спектра

$$F(\lambda_0,\mathbf{k}_0+\mathbf{q})\simeq F(\lambda_0,\mathbf{k}_0)=F_0=m_0^2\frac{m_1+m_2+m_3}{3m_1m_2m_3},$$

$$g(\lambda_0,\mathbf{k}_0+q)\simeq g(\lambda_0,\mathbf{k}_0), \tag{5}$$

m_i^{-1} — главные значения тензора обратных эффективных масс в точке (λ_0, $\mathbf{k}_0$). Из (3)—(5) следует, что при $T=0$ в области параболичности спектра

$$\delta\chi_c(E_f)=B_c\delta\nu(E_f), \tag{6}$$

$$B_c=B_{\lambda_0\mathbf{k}_0}=\frac{e^2\hbar^2}{2m_0^2c^2}\left[\left(\frac{g(\lambda_0\mathbf{k}_0)}{2}\right)^2-\frac{1}{3}F_0\right],$$

где $\nu(E)$ — плотность состояний с учетом спина; $\delta\nu(E)$ — вклад окрестности критической точки в плотность состояний; $\varepsilon=E-E_c$; $E_f=\mu$ ($T=0$);

$E_c = E_{\lambda_0 \mathbf{k}_0}$. Для аналитических критических точек ($m_i^{-1} \neq 0$) имеют место следующие соотношения [1, 14]:

точка M_0, минимум ($m_1, m_2, m_3 > 0$)

$$\delta\nu(\varepsilon) = C\theta(\varepsilon)\varepsilon^{1/2}, \quad \delta n(\varepsilon) = \nu_c\varepsilon + {}^2/_3 C\theta(\varepsilon)\varepsilon^{3/2}, \tag{7}$$

точка M_1, седловая точка 1-го типа ($m_1, m_2 > 0, m_3 < 0$)

$$\delta\nu(\varepsilon) = \delta\nu_c - C\theta(-\varepsilon)(-\varepsilon)^{1/2}, \quad \delta n(\varepsilon) = \nu_c\varepsilon + {}^2/_3 C\theta(-\varepsilon)(-\varepsilon)^{3/2}, \tag{8}$$

точка M_2, седловая точка 2-го типа ($m_1 > 0, m_2, m_3 < 0$)

$$\delta\nu(\varepsilon) = \delta\nu_c - C\theta(\varepsilon)\varepsilon^{1/2}, \quad \delta n(\varepsilon) = \nu_c\varepsilon - {}^2/_3 C\theta(\varepsilon)(\varepsilon)^{3/2}, \tag{9}$$

точка M_3, максимум ($m_1, m_2, m_3 < 0$)

$$\delta\nu(\varepsilon) = C\theta(-\varepsilon)(-\varepsilon)^{1/2}, \quad \delta n(\varepsilon) = \nu_c\varepsilon - {}^2/_3 C\theta(-\varepsilon)(-\varepsilon)^{3/2}, \tag{10}$$

$\theta(\varepsilon)$ — функция Хэвисайда, $\nu_c = \nu(E_c)$, $\delta\nu_c = \delta\nu(E_c)$, $n(E)$ — полная концентрация носителей тока, $\delta n(E) = n(E) - n_c$, $n_c = n(E_c)$. Для экстремумов $\delta\nu_c = 0$, для седловых точек $\delta\nu_c \neq 0$. Для неаналитических критических точек, когда одна или несколько обратных масс m_i^{-1} обращаются в нуль, необходим учет непараболических членов разложения $\varepsilon(\mathbf{q}) = E_{\lambda_0\mathbf{k}_0+\mathbf{q}} - E_{\lambda_0\mathbf{k}_0}$. В результате в выражениях (7)—(10) вместо $(\pm\varepsilon)^{1/2}$, $(\pm\varepsilon)^{3/2}$ появляются $(\pm\varepsilon)^{\alpha}$ и $(\pm\varepsilon)^{1+\alpha}$, где $0 \leqslant \alpha < 1/2$ и соответственно изменяются выражения для коэффициентов C.

С экспериментальной точки зрения интерес представляет зависимость особой части плотности состояний $\delta\nu$ и соответственно $\delta\chi_c$ от полной концентрации носителей тока n. Для минимума на краю зоны ($\nu_c = n_c = 0$) $\delta\nu \sim n^{1/3}$. Однако для критической точки в глубине зоны ($\nu_c \neq 0$, $n_c \neq 0$) из (7)—(10) следует, что при $|n - n_c| \ll 2\nu_c^3/C^2$

$$n - n_c = \nu_c\varepsilon, \quad \delta\nu(n) = \delta\nu_c \pm \frac{C}{\sqrt{\nu_c}} \begin{cases} \theta(n - n_c)(n - n_c)^{1/2}, \\ \theta(n_c - n)(n_c - n)^{1/2}. \end{cases} \tag{11}$$

Таким образом, в критических точках, расположенных в глубине зоны, $\nu(n)$ и, следовательно, $\chi_c(n)$ имеют особенность, хотя и с другим показателем, чем на краю зоны (1/2 вместо 1/3).

Отметим одно следствие из (6)—(11), которое понадобится в дальнейшем: при $n = n_c$ вклад критической точки в χ_c для экстремумов минимален (равен нулю), а для седловых точек — максимален.

Обсудим теперь концентрационную зависимость межзонного вклада χ_b в окрестности невырожденной критической точки при $T = 0$. Рассмотрим величину $\delta\chi_b = \chi_b(n) - \chi_b(n_c) = \chi_b(E_f) - \chi_b(E_c)$. Согласно (1),

$$\delta\chi_b = \frac{1}{V}\sum_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda\mathbf{k}}[f(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_f) - f(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_c)].$$

При $T = 0$ величина $\delta\chi_b$ определяется межзонными переходами из состояний $E_{\lambda\mathbf{k}}$ в слое между E_f и E_c. Выделим сначала вклад состояний, близких к критической точке. Для этого заметим, что коэффициенты $A_{\lambda\mathbf{k}}$ имеют вид [12]

$$A_{\lambda\mathbf{k}} = \sum_{\mu}{}' \frac{a_{\lambda\mu}(\mathbf{k})}{E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\mu\mathbf{k}}} + \sum_{\mu,\nu}{}' \frac{b_{\lambda\mu\nu}(\mathbf{k})}{(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\mu\mathbf{k}})(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\nu\mathbf{k}})} + \sum_{\mu,\nu,\eta}{}' \frac{c_{\lambda\mu\nu\eta}(\mathbf{k})}{(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\mu\mathbf{k}})(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\nu\mathbf{k}})(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_{\eta\mathbf{k}})}, \tag{12}$$

где коэффициенты $\hat{a}$, $\hat{b}$ и $\hat{c}$ построены из произведений матричных элементов операторов скорости и спина, свернутых по спиновым и пространственным индексам. Пусть E_m — минимальная энергия прямого межзонного перехода из состояний $|\lambda_0 \mathbf{k}_0\rangle$. Тогда при $|E_f - E_c| \ll E_m$ вклад состояний вблизи $|\lambda_0 \mathbf{k}_0\rangle$ в $\delta\chi_b$ принимает вид

$$\delta\chi_b(\lambda_0 \mathbf{k}_0) = A_c \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} [f(E_{\lambda_0 \mathbf{k}_0+\mathbf{q}} - E_f) - f(E_{\lambda_0 \mathbf{k}_0+\mathbf{q}} - E_c)],$$

где $A_c = A_{\lambda_0 \mathbf{k}_0}$. В результате для экстремума на краю зоны ($\nu_c = n_c = 0$) получаем

$$\delta\chi_b = \chi_b = A_c n, \tag{13}$$

а для критических точек в глубине зоны ($\nu_c \neq 0$, $n_c \neq 0$)

$$\delta\chi_b(\lambda_0 \mathbf{k}_0) = A_c \frac{\delta\nu_c}{\nu_c}(n - n_c) \pm \frac{2}{3} A_c \frac{C}{\nu_c^{3/2}} \begin{cases} \theta(n - n_c)(n - n_c)^{3/2}, \\ \theta(n_c - n)(n_c - n)^{3/2}. \end{cases} \tag{14}$$

Отметим, что первое (линейное по $n - n_c$) слагаемое в правой части (14) отлично от нуля только для седловых точек ($\delta\nu_c \neq 0$) и отсутствует для экстремумов.

Рассмотрим теперь вклад состояний, близких к критической точке по энергии, но далеких в $\mathbf{k}$-пространстве. При $|E_f - E_c| \ll E_c$

$$\delta\chi_b = \frac{1}{V} \sum_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda\mathbf{k}} \frac{\partial}{\partial\mu} f \Big|_{\mu=E_c} (E_f - E_c), \tag{15}$$

откуда, учитывая (11), при $T=0$ получаем

$$\delta\chi_b = \bar{A}_c (n - n_c), \quad \bar{A}_c = \frac{1}{\nu_c V} \sum_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda\mathbf{k}} \delta(E_{\lambda\mathbf{k}} - E_c). \tag{16}$$

Здесь $\bar{A}_c$ — коэффициент $A_{\lambda\mathbf{k}}$, усредненный по Ферми-поверхности, проходящей через критическую точку. Для экстремума на краю зоны выражение в правой части (15) обращается в нуль (как и $\bar{A}_c$ в (16)), разложение $\delta\chi_b$ по степеням $E_f - E_c$ лишено смысла, так как в этом случае χ_b неаналитически зависит от энергии, и поведение $\chi_b(n)$ определяется вблизи края зоны выражением (13). Для вырожденных точек зонного спектра поведение $\delta\chi_b$ существенно зависит от поведения коэффициентов $\hat{a}$, $\hat{b}$ и $\hat{c}$ в (12)

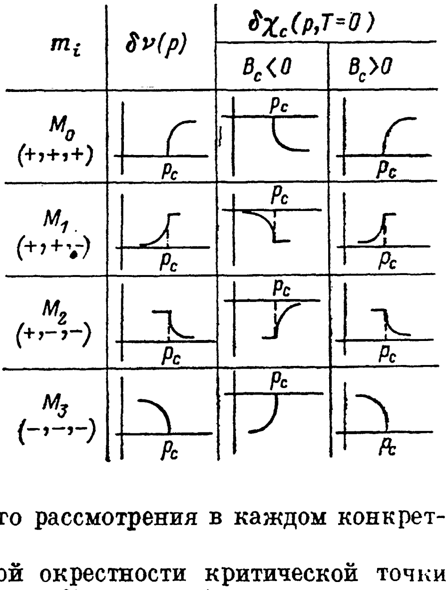

Рис. 1. Поведение особой части МВ при $T=0$ в окрестности невырожденных нормальных ($m_i^{-1} \neq 0$) критических точек спектра.

и решение задачи требует специального рассмотрения в каждом конкретном случае.

Таким образом, в непосредственной окрестности критической точки $\chi_b(n) - \chi_b(n_c) \sim n - n_c$ и, следовательно, χ_b может быть наряду с χ_d и неособым вкладом носителей $\chi_c^{(0)}$ включена в регулярную часть МВ, на фоне которой должна наблюдаться (слева или справа от n_c в зависимости от типа критической точки) особая часть $\delta\chi_c \sim |n - n_c|^{1/2}$, имеющая бесконечную производную в критической точке. Поведение $\delta\chi_c(n)$ при $T=0$ для различных типов критических точек и в зависимости от знака B_c в (6) представлено на рис. 1. Как видно из этого рисунка, парамагнитные (диамагнитные) носители в точке M_0 приводят к особенности того же вида, что и диамагнитные (парамагнитные) носители в точке M_2, и аналогично для точек M_1 и M_3. Различие имеется лишь между этими двумя парами точек. Результаты следующего раздела показывают, что необходимую для определения типа критической точки информацию в некоторых случаях дает анализ высокотемпературных зависимостей МВ вблизи критической точки.

При реализации предлагаемого метода возникает трудность, связанная с тем, что однозначно установить наличие особенностей Ван Хова на экспериментальной кривой $\chi(n, T=0)$ без дополнительной информации практически невозможно, поскольку через конечное число экспериментальных точек $\chi^i = \chi(n_i, T=0)$ с учетом их неизбежного разброса из-за неточности измерений n_i и χ_i всегда можно провести гладкую интерполирующую кривую, возможно немонотонную, но без особенностей. При этом немонотонность зависимости $\chi(n, T=0)$ или просто резкое изменение МВ в некоторой области концентраций носителей тока можно объяснить, например, наличием нескольких, отличающихся знаком и имеющих разную зависимость, вкладов в МВ. Из результатов работы [15] следует также, что к немонотонному поведению каждого из вкладов $\chi_{LP}(n)$ и $\chi_{ES}(n)$ может приводить сильная непараболичность энергетического спектра носителей тока.

В разделе *2* будет показано, что необходимую дополнительную информацию о форме экспериментальной кривой $\chi(n)$ при $T=0$, позволяющую установить наличие аномалий МВ, связанных с особенностями Ван Хова для плотности состояний, можно получить из температурных зависимостей $\chi(n, T)$ в области низких температур.

2. Температурные зависимости МВ

Как было отмечено ранее, температурная зависимость МВ определяется вкладом зонных электронов $\tilde{\chi}_b$. Переходя в выражениях (1) к интегрированию по энергиям, получаем

$$\chi_c(T) = -\int_{-\infty}^{\infty} dE \chi_c(E, T=0) \frac{\partial}{\partial E} f(E-\mu),$$

$$\chi_b(T) = \int_{-\infty}^{\infty} dE f(E-\mu) \frac{\partial}{\partial E} \chi_b(E, T=0), \tag{17}$$

где

$$\chi_c(E, T=0) = \frac{1}{V} \sum_{\lambda\mathbf{k}} B_{\lambda\mathbf{k}} \delta(E_{\lambda\mathbf{k}} - E),$$

$$\frac{\partial}{\partial E} \chi_b(E, T=0) = \frac{1}{V} \sum_{\lambda\mathbf{k}} A_{\lambda\mathbf{k}} \delta(E_{\lambda\mathbf{k}} - E). \tag{18}$$

В области не слишком высоких температур, когда можно пренебречь вкладом собственных носителей тока, можно представить вклад зонных электронов $\tilde{\chi}_b$ в следующем виде:

$$\tilde{\chi}_b(T) = \chi_b(T) + \chi_c(T) = \int_0^{\infty} dE f(E-\mu) \frac{\partial}{\partial E} \tilde{\chi}_b(E, T=0). \tag{19}$$

При сделанных выше предположениях условие электронейтральности, которое является уравнением относительно $\mu(T)$, можно записать в виде

$$n = \int_0^{\infty} dE \nu(E) f(E-\mu) = \int_0^{E_f} dE \nu(E). \tag{20}$$

Соотношения (17)—(20) полностью описывают температурную зависимость $\tilde{\chi}_b$, связанную с температурной зависимостью равновесной функции распределения носителей тока. Кроме того, имеется неявная зависимость $\tilde{\chi}_b$ от температуры, связанная с влиянием теплового расширения кристалла, а также электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействия на зонный спектр при конечных температурах. Эта зависимость может быть учтена, если в соотношениях (17)—(20) считать $E_{\lambda\mathbf{k}}$, E_c и соответственно $A_{\lambda\mathbf{k}}$ и $B_{\lambda\mathbf{k}}$ зависящими от температуры величинами.

а) Низкие температуры. Рассмотрим область низких температур $T \ll T_f$ (о величине температуры вырождения T_f см. ниже). При сделанных выше предположениях о поведении МВ дефектов и примесей χ_d и при учете лишь явной температурной зависимости $\tilde{\chi}_b$ через функцию распределения носителей тока имеет место равенство (при $T \ll T_f$)

$$\chi(T) - \chi(T=O) = \frac{\pi^2}{6}\nu^2(n)\frac{\partial^2}{\partial n^2}\chi(n, T=O)T^2 + O(T^4). \tag{21}$$

Действительно, применяя низкотемпературное разложение [14] к правой части равенства (19) и учитывая, что $\partial/\partial E = \nu\partial/\partial n$, получаем

$$\chi(T) - \chi(T=O) \simeq \tilde{\chi}_b(T) - \tilde{\chi}_b(T=O) = \frac{\partial}{\partial E}\tilde{\chi}_b(E=E_f, T=0)\,\delta\mu(T) +$$
$$+ \frac{\pi^2}{6}\frac{\partial^2}{\partial E^2}\tilde{\chi}_b(E=E_f, T=O)T^2 + O(T^4) =$$
$$= \left[\nu\delta\mu(T) + \frac{\pi^2}{6}\frac{\partial}{\partial E}\nu(E=E_f)T^2\right]\frac{\partial}{\partial n}\tilde{\chi}_b(n, T=O) +$$
$$+ \frac{\pi^2}{6}\nu^2(n)\frac{\partial^2}{\partial n^2}\tilde{\chi}_b(n, T=O)T^2 + O(T^4), \tag{22}$$

где $\delta\mu(T) = \mu(T) - E_f$. Применяя низкотемпературное разложение к уравнению (20), получаем

$$\nu\delta\mu(T) + \frac{\pi^2}{6}\frac{\partial}{\partial E}\nu(E=E_f)T^2 + O(T^4) = 0, \tag{23}$$

откуда следует, что первое слагаемое в правой части (22) имеет порядок $O(T^4)$, что и доказывает справедливость (21) при условии линейной связи между χ_d и n.

Таким образом, если в области температур $T \ll T_f$ можно пренебречь неявной температурной зависимостью $\tilde{\chi}_b$ через $E_{\lambda\mathbf{k}}(T)$, то поведение $\chi(T)$ в области низких температур определяется выражением (21) и, следовательно, содержит информацию о второй производной МВ по концентрации носителей тока при $T=0$ $\chi''_{nn}(n, T=0)$ и, в частности, о знаке $\chi''_{nn}(n, T=0)$. При не слишком сильном размытии поверхности Ферми, связанном с неупорядоченностью материала, — не превышающем неопределенности в положении уровня Ферми из-за неточности определения концентрации носителей тока — это дает принципиальную возможность установить наличие особенности Ван Хова на экспериментальной кривой $\chi(n, T=0)$.

На рис. 2 представлены возможные типы поведения $\chi(n, T=0)$ вблизи точки минимума (точка M_0) для $B_c > 0$ или седловой точки 2-го типа (точка M_2) для $B_c < 0$ (*а—г*, верхняя строка). В нижней строке представлены соответствующие сглаженные зависимости, не содержащие особенности. Вертикальные штриховые линии разделяют области с $\chi''_{nn}(n, T=0) \gtrless 0$. Видно, что в случаях *а—в* достаточно анализа знаков χ''_{nn}, чтобы установить наличие особенности при $n=n_c$. В случае *г* анализа знаков χ''_{nn} недостаточно и требуется сравнение величин $\chi''_{nn}(n, T=0)$ для кривой с особенностью и для сглаженной кривой. На сглаженной кривой χ''_{nn} непрерывна и проходит через нуль в точке перегиба. В случае же критической точки $\chi''_{nn}(n \to n_c+0) \sim \delta\chi''_{cnn}(n \to n_c+0) \sim (n-n_c)^{-3/2} \to -\infty$ (см. (6), (11)), а $\chi''_{nn}(n \to n_c-0) > 0$ и конечна, что должно приводить к сильной асимметрии низкотемпературного поведения МВ для $n < n_c$ и $n > n_c$.

Для иллюстрации метода на рис. 2, *д* представлено поведение МВ для случая двух близких критических точек (минимума и седловой точки 1-го типа или седловой точки 2-го типа и максимума). Видно, что анализ

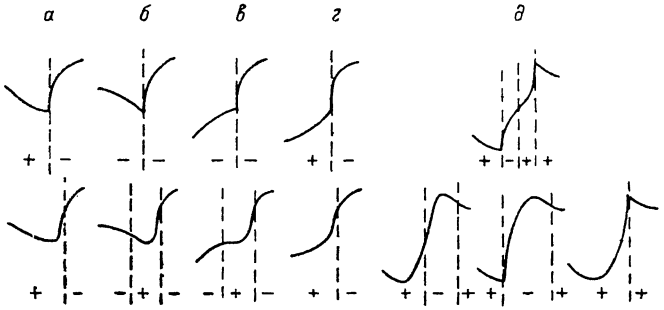

Рис. 2. Возможное (вверху) поведение χ (n, $T=0$) в окрестности критической точки спектра (*а*—*г*) в случае двух близких критических точек (*д*) и соответствующие сглаженные зависимости (внизу).

знаков χ''_{nn} (n, $T=0$) позволяет сделать однозначный выбор между кривой с двумя особенностями (вверху) и кривыми с одной особенностью или без особенностей (внизу) в случае сложной, немонотонной, зависимости МВ от концентрации носителей тока.

б) Высокие температуры ($T > T_f$). Для блоховских электронов температура вырождения T_f, вообще говоря, не совпадает с энергией Ферми E_f, как это имеет место для однородного электронного газа [16]. При наличии нескольких групп носителей тока имеется несколько температур вырождения $T_f = |E_f - E_c|$, где E_c определяет положение соответствующих критических точек спектра. Область применимости низкотемпературного разложения [14] определяется минимальной при данной концентрации носителей тока n температурой вырождения, для которой сохраняется обозначение T_f.

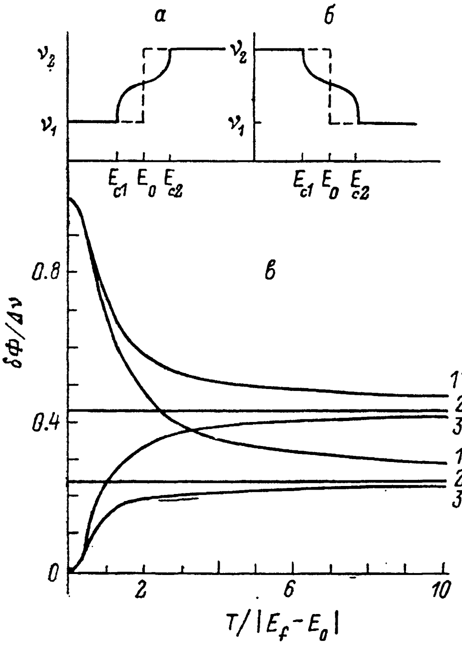

Рис. 3. Плотности состояний для случаев двух близких критических точек спектра (штрихи — соответствующие модели типа ступеньки, прямая и обратная) (*а*, *б*) и температурные зависимости $\delta\Phi$ (E_f, T)/$\Delta\nu$ ($\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$) для модели ступеньки в плотности состояний (*в*).

Полное снятие вырождения происходит лишь при $T \gg T_f^{(0)} = E_f$, т. е. определяется максимальной температурой вырождения $T_f^{(0)}$. Таким образом, область температур $T_f \leqslant T \leqslant T_f^{(0)}$ соответствует случаю промежуточного вырождения.

Если бы критические точки в глубине зоны отсутствовали, то $T_f = T_f^{(0)} = E_f(n)$ монотонно росла бы с ростом концентрации носителей тока. Поскольку параметром разложения (21), (22) является $(T/T_f)^2$, то соответственно росла бы в этом случае и область температур, в которой $\chi(T)-\chi(0) \sim T^2$. При этом для температур $T < T_f^{(0)} = E_f$ отсутствовали бы точки экстремумов или перегиба на кривой $\chi(T)$, за исключением, возможно, концентраций носителей тока, соответствующих точкам перегиба на кривой $\chi(n, T=0)$. Нарушение такого поведения $\chi(n, T)$ является косвенным признаком наличия критических точек в глубине зоны.

Вблизи критической точки спектра, когда $T_f \ll T_f^{(0)}$, температурная зависимость МВ при $T \ll T_f$ определяется прежде всего температурным размытием поверхности Ферми, т. е. зависимостью $\delta\chi_c(T)$. Однако при $T > T_f$ поведение МВ не является универсальным и зависит от поведения особой части плотности состояний $\delta\nu$, а при наличии других критических точек — от расстояния до них и от поведения плотности состояний в окрестности этих точек.

Рассмотрим ситуацию с двумя близкими критическими точками $\Delta = E_{c2} - E_{c1} \ll E_{c1}, E_{c2}$, которой соответствует поведение МВ на рис. 2, *д*. К такому поведению МВ между критическими точками, согласно рис. 1, приводят две различные пары точек: минимум при E_{c1} и седловая точка 1-го типа при E_{c2} или седловая точка 2-го типа при E_{c1} и максимум при E_{c2}. На рис. 3, *а*, *б* изображены соответствующие модельные плотности состояний в предположении сильного изменения плотности состояний $\delta\nu(E)$ между E_{c1} и E_{c2}, связанного с критическими точками, на фоне слабо изменяющегося вклада в плотность состояний от остальной части спектра.

С помощью такой упрощенной модели плотности состояний можно показать, что в области температур $\Delta < T \ll E_{c1}, E_{c2}$ возникает промежуточная асимптотика для $\delta\chi_c(T)$, причем $\partial/\partial T \delta\chi_c(T)$ в этой области температур меняет знак при некоторой энергии $E_{c1} < E_0 < E_{c2}$. В предположении о слабой дисперсии коэффициента $B_{\lambda k}$ в (1) получаем из (6) и (17)

$$\delta\chi_c(T) = B_c \delta\Phi(T), \qquad \delta\Phi(T) = \int_{E_{c1}}^{E_{c2}} dE \delta\nu'_E(E) f(E-\mu). \tag{24}$$

При $T \gg \Delta$ получаем из (24)

$$\delta\Phi(T) \simeq \Delta\nu \begin{cases} f(E_0-\mu), & (25а) \\ f(\mu-E_0), & (25б) \end{cases}$$

где $\Delta\nu = \nu_2 - \nu_1$, $E_{c1} < E_0 < E_{c2}$, (25а) и (25б) соответствуют рис. 3, *а*, *б*.

На рис. 3, *в* представлены зависимости $\delta\Phi(T)/\Delta\nu$ для высокой $\gamma = \gamma = \Delta\nu/\nu_1 = 4$ (*1*—*3*) и низкой $\gamma = 0.4$ (*1'*—*3'*) «ступенек» в плотности состояний для случаев $E_f > E_0$, $E_f = E_0$, $E_f < E_0$ для прямой ступеньки и $E_f < E_0$, $E_f = E_0$, $E_f > E_0$ для обратной ступеньки. Зависимость $\mu(T)$ была получена из решения уравнения (20) в области температур $T \gg \Delta$, из которого следует также уравнение для E_0

$$1 - \frac{1}{\Delta\nu\Delta} \int_{E_{c1}}^{E_{c2}} dE \delta\nu(E) - \frac{E_0 - E_{c1}}{\Delta} - \frac{\gamma}{\Delta\nu\Delta} \int_{E_{c1}}^{E_0} dE \delta\nu(E) = 0. \tag{26}$$

Учитывая, что $\delta\Phi(T=0) = \delta\nu(E_f)$, а также различия в поведении $\delta\Phi(T \gg \Delta)$ для случаев *а* и *б* (рис. 3), находим, что температурные зависимости МВ в области высоких температур позволяют различать эти две ситуации при одинаковом низкотемпературном поведении МВ. Заметим также, что фактически переход от низкотемпературного поведения, описываемого выражениями (21)—(23), к высокотемпературному поведению, «хвост» которого при $T \gg \Delta$ рассмотрен выше, происходит при $T \sim T_f$.

В заключение считаю своим приятным долгом поблагодарить В. Л. Гуревича и участников руководимого им семинара за интерес к работе и полезное обсуждение. Я признателен также Ю. И. Равичу и А. К. Таганцеву за обсуждение работы и ряд важных замечаний.

Список литературы

[1] Van Hove L. // Phys. Rev. 1953. V. 89. N 6. P. 1189—1193.
[2] Лифшиц И. М. // ЖЭТФ. 1960. Т. 38. № 5. С. 1569—1576.
[3] Вакс В. Г., Трефилов А. В., Фомичев С. В. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 4. С. 1613—1621.
[4] Егоров В. С., Федоров А. Н. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 5. С. 1647—1657.
[5] Herman F., Cortum R. L., Ortenburger I. B., Van Dyke J. R. // J. de Physique. 1968. V. 29. N 11—12. Suppl. P. 63—77.
[6] Bowers R., Vafet Y. // Phys. Rev. 1959. V. 115. N 5. P. 1165—1172.
[7] Misra P. K., Kleinman L. // Phys. Lett. 1972. V. 40A. N 5. P. 359—360.
[8] Бенеславский С. Д., Фальковский Л. А. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 3. С. 1063—1071.
[9] Фальковский Л. А. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. № 1. С. 334—348. Ч. 1.
[10] Blount E. I. // Phys. Rev. 1962. V. 126. N 5. P. 1636—1653.
[11] Roth L. M. // J. Phys. Chem. Sol. 1962. V. 23. N 5. P. 433—446.
[12] Misra P. K., Kleinman L. // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. N 11. P. 4581—4597.
[13] Cohen M. H., Blount E. I. // Phil. Mag. 1960. V. 5. N 50. P. 115—126.
[14] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. I. М.: Наука, 1976. 584 с.
[15] Zawadski W. // Phys. St. Sol. 1963. V. 3. N 8. P. 1421—1428.
[16] Каганов М. И., Лифшиц И. М. // УФН. 1979. Т. 129. № 3. С. 487—529.

Институт химии силикатов АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
23 ноября 1989 г.