# Классификация частот осцилляций Шубникова–де-Гааза в слоистых зарядово-упорядоченных кристаллах при наличии магнитного пробоя

© П.В. Горский

Черновицкий национальный университет,
58000 Черновцы, Украина

(Получена 18 декабря 2001 г. Принята к печати 20 июня 2002 г.)

Доказано существование „магнитопробойных“ частот осцилляций Шубникова–де-Гааза в слоистых зарядово-упорядоченных кристаллах. Проведена классификация „магнитопробойных“ частот.

На сегодня обработка экспериментальных результатов по измерениям эффектов де-Гааза–ван-Альфена (ДГВА) и де-Гааза–Шубникова (ДГШ) проводится главным образом на основе теории Лифшица и Косевича (ЛК) [1], которая однозначно связывает частоты осцилляций ДГВА и ДГШ с экстремальными сечениями поверхности Ферми (ПФ) плоскостями, перпендикулярными направлению магнитного поля. Однако, во-первых, теория ЛК справедлива лишь при условии применимости квазиклассического приближения, которое справедливо при условии малости расстояния между уровнями Ландау в сравнении с энергией Ферми. Во-вторых, даже при условии справедливости квазиклассического приближения форма ПФ может быть восстановлена по ее экстремальным сечениям лишь тогда, когда эти последние мало отличаются от кругов или эллипсов, т.е. в рамках приближения почти свободных электронов [2], которое оправдано для большинства нормальных металлов. Однако существует целый ряд полупроводниковых структур, в частности полупроводники со сверхрешеткой [3], для которых это приближение не оправдывается. В этом случае, как показано в работе [4], частоты осцилляций ДГВА однозначно выражаются через энергию Ферми и фурье-трансформанты энергии межслоевого движения электронов, причем не все из этих частот могут быть отождествлены с сечениями поверхности Ферми, пусть не обязательно экстремальными. Даже в случае узкой минизоны проводимости, когда для определения энергии межслоевого движения электронов достаточно одной фурье-трансформанты, теория ЛК справедлива лишь тогда, когда в узкой минизоне проводимости укладывается достаточно много уровней Ландау. Это справедливо не только для эффекта ДГВА, но и для эффекта ДГШ, если только можно пренебречь влиянием магнитного поля на рассеяние. Однако [5] в условиях, когда эффект ДГШ выражен достаточно ярко, необходимо учитывать влияние магнитного квантования не только на спектр носителей тока, но и на рассеяние. В [5] показано, что если считать время релаксации обратно пропорциональным плотности состояний в магнитном поле, что справедливо в частности для рассеяния носителей тока на акустических фононах, то в случае узкой минизоны проводимости частоты осцилляций ДГШ полностью совпадают с даваемыми теорией ЛК, хотя их относительный вклад существенно отличен от такового в квазиклассическом приближении, т.е. спектр осцилляций ДГШ является более простым, чем спектр осцилляций ДГВА. Однако это, вообще говоря, неверно, если гофрировка ПФ является более сложной, т.е. для описания межслоевого движения электронов недостаточно приближения сильной связи. Тем не менее в зарядово-упорядоченных слоистых кристаллах, к числу которых принадлежат некоторые полупроводники со сверхрешеткой, дихалькогениды переходных металлов, интеркаллированные соединения графита [6,7] и ряд других кристаллов, возможна достаточно простая и удобная для обработки и интерпретации экспериментальных данных классификация частот осцилляций ДГШ, которая и является предметом настоящей статьи.

В работе [8] показано, что в резко анизотропных (квазидвумерных) слоистых структурах возможно зарядовое упорядочение, заключающееся в простом чередовании более и менее заполненных электронами слоев и обусловленное эффективным притяжением между электронами за счет конкуренции электрон-фононного взаимодействия и кулоновского отталкивания. В этом случае энергия электрона в квантующем магнитном поле $H$, перпендикулярном слоям, дается выражением

$$\varepsilon_{\pm}(n, k_z) = \mu^* H(2n+1) \pm \sqrt{W_0^2\delta^2 + \Delta^2 \cos^2 ak_z}, \quad (1)$$

если начало отсчета энергии выбрать посредине щели между минизонами. В формуле (1) введены следующие обозначения: $\mu^* = \mu_B \frac{m_0}{m^*}$, $\mu_B$ — магнетон Бора, $m_0$ — масса свободного электрона, $n$ — номер уровня Ландау, $m^*$ — эффективная масса электрона в плоскости слоя, $W_0$ — эффективная константа притягивающего взаимодействия, которая в приближении самосогласованного поля прямо пропорциональна концентрации электронов, $\delta$ — параметр упорядочения, описывающий неэквивалентность заполнения слоев электронами и равный отношению разности плотностей электронов на соседних слоях к средней плотности электронов (при абсолютном нуле температуры $\Delta = 0$, $H = 0$, $\delta \to 1$, в отсутствие упорядочения $\delta = 0$), $\Delta$ — полуширина минизоны в отсутствие упорядочения, $k_z$ — компонента квазиимпульса в направлении, перпендикулярном слоям, $a$ — расстояние между трансляционно-эквивалентными слоями.

Считая время релаксации электронов обратно пропорциональным плотности состояний в магнитом поле [9], осциллирующую часть электропроводности $\sigma_{zz}$ при рассеянии на акустических фононах в приближении $h\nu \ll kT \ll \mu^* H$ ($\nu$ — наибольшая частота фононов), пользуясь общими формулами работы [5], можно представить в виде

$$\sigma_{os} = \sigma_{LK} + \sigma_{MB}, \tag{2}$$

где $\sigma_{LK}$ — часть электропроводности, частоты осцилляций которой однозначно связаны с экстремальными сечениями ПФ плоскостями, перпендикулярными полю, $\sigma_{MB}$ — так называемая „магнитопробойная“ часть электропроводности, которую мы проанализируем несколько подробнее. Ее в зависимости от величины энергии Ферми можно представить в форме:

$$\text{при } \xi \le -\Delta_\delta \quad \sigma_{MB} = 0, \tag{3}$$

при $-\Delta_\delta \le \xi \le -W_0\delta$

$$\sigma_{MB} = \frac{32\pi\tau_0 e^2 m^* a\Delta}{h^4 kT|\mu^* H|} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left(\frac{\pi l}{\mu^* H}\right) \left(W_0^4\delta^4 - W_0^2\delta^2\Delta^2\right) \times \left[\cos\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Si}\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right) + \mathrm{Si}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right)\right] + \sin\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\right]\right], \tag{4}$$

при $-W_0\delta \le \xi \le W_0\delta$

$$\sigma_{MB} = \frac{32\pi\tau_0 e^2 m^* a\Delta}{h^4 kT|\mu^* H|} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left(\frac{\pi l}{\mu^* H}\right) \left(W_0^4\delta^4 - W_0^2\delta^2\Delta^2\right) \times \left[\cos\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Si}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Si}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right)\right] - \sin\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right)\right]\right]. \tag{5}$$

При $W_0\delta \le \xi \le \Delta_\delta$ $\sigma_{MB}$ получается суммированием выражения (5) и слагаемого $\sigma_{MB}^{(1)}$, которое равно

$$\sigma_{MB}^{(1)} = \frac{32\pi\tau_0 e^2 m^* a\Delta}{h^4 kT|\mu^* H|} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left(\frac{\pi l}{\mu^* H}\right) \left(W_0^2\delta^2\Delta^2 - W_0^4\delta^4\right) \times \left[\cos\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Si}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Si}\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\right] + \sin\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right)\right]\right]. \tag{6}$$

При $\xi > \Delta_\delta$ $\sigma_{MB}(H)$ получается суммированием выражения (5) и слагаемого $\sigma_{MB}^{(2)}$, которое равно

$$\sigma_{os}^{(2)} = \frac{32\pi\tau_0 e^2 m^* a\Delta}{h^4 kT|\mu^* H|} \times \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \left(\frac{\pi l}{\mu^* H}\right) \left(W_0^2\delta^2\Delta^2 - W_0^4\delta^4\right) \times \left[\cos\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Si}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Si}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right)\right] + \sin\left(\frac{\pi l\xi}{\mu^* H}\right)\left[\mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l\Delta_\delta}{\mu^* H}\right) - \mathrm{Ci}\left(\frac{\pi l W_0\delta}{\mu^* H}\right)\right]\right]. \tag{7}$$

$$f_l^\delta = (\pi^2 lkT/\mu^* H)/\,\mathrm{sh}(\pi^2 lkT/\mu^* H). \tag{8}$$

В формулах (4)–(8) введены следующие обозначения: $\xi$ — химический потенциал электронов, отсчитанный от середины щели между минизонами, $\Delta_\delta = \sqrt{W_0^2\delta^2 + \Delta^2}$, $\tau_0$ — постоянная кристалла, имеющая размерность времени и характеризующая интенсивность рассеяния, $T$ — абсолютная температура, $\mathrm{Si}(\ldots)$ и $\mathrm{Ci}(\ldots)$ — соответственно интегральный синус и интегральный косинус, $\mathrm{sh}(\ldots)$ — гиперболический синус, остальные обозначения, за исключением общепринятых, объяснены выше. Отметим, что формулы типа (3)–(8) справедливы не только для рассеяния носителей тока на акустических фононах, но и для других механизмов рассеяния, для которых время релаксации продольного импульса обратно пропорционально плотности состояний. В этих случаях должны быть видоизменены только множители перед знаками сумм по $l$.

Из формул (4)–(7) видно, что при $\Delta_\delta/\mu^* H \ll 1$ и $W_0\delta/\mu^* H \ll 1$, когда интегральные синус и косинус представимы полиномами [10], основная частота „магнитопробойных“ осцилляций по переменной $1/H$ определяется по формуле

$$\omega_1 = \pi\xi/\mu^*, \tag{9}$$

и при $\delta \ne 0$, т. е. при наличии упорядочения, она ни при каких условиях не может быть отождествлена с каким-либо сечением ПФ плоскостью, перпендикулярной полю.

Однако в промежуточных полях, когда интегральный синус и интегральный косинус представимы асимптотическими разложениями, содержащими синусы и косинусы соответствующих аргументов, картина осцилляций получается более сложной. В частности, из формулы (4) следует, что при $-\Delta_\delta \le \xi \le -W_0\delta$ основные частоты „магнитопробойных“ осцилляций определяются по формулам

$$\omega_2 = 2\pi\xi/\mu^*, \tag{10}$$

$$\omega_3 = \pi|\xi - \Delta_\delta|/\mu^*, \tag{11}$$

и они в области $-\Delta_\delta \le \xi \le -W_0\delta$ не могут быть отождествлены с какими-либо сечениями ПФ плоскостями, перпендикулярными полю. Частота же

$$\omega_4 = \pi(\xi + \Delta_\delta)/\mu^* \tag{12}$$

отождествляется со стационарными сечениями ПФ плоскостями $k_z = 0$ и $k_z = \pm\pi/a$. ПФ в этой области состоит из трех несвязанных между собой частей.

В области $-W_0\delta < \xi < W_0\delta$, когда ПФ становится связной, наряду с частотами, определяемыми по формулам (11) и (12), из которых $\omega_3$ — „магнитопробойная", а $\omega_4$ — квазиклассическая, появляются новые частоты осцилляций, определяемые по формулам

$$\omega_5 = \pi|\xi - W_0\delta|/\mu^*, \tag{13}$$

$$\omega_0 = \pi(\xi + W_0\delta)/\mu^*. \tag{14}$$

При этом $\omega_5$ не может быть отождествлена с какими-либо стационарными сечениями ПФ плоскостями, перпендикулярными полю. Частота же $\omega_6$ связана со стационарными сечениями „перешейков", возникающих при превращении ПФ из несвязной в открытую. Однако при $\xi > W_0\delta - \Delta_\delta/2$ частота $\omega_5$ уже не может классифицироваться как чисто „магнитопробойная", поскольку она отождествляется с нестационарными сечениями ПФ четырьмя плоскостями, уравнения которых имеют вид

$$k_z = \pm\arccos\big((4\xi^2 - 4\xi W_0\delta)^{\frac{1}{2}}/\Delta\big)/a, \tag{15}$$

$$k_z = \pm\big[\pi - \arccos\big((4\xi^2 - 4\xi W_0\delta)^{\frac{1}{2}}/\Delta\big)\big]/a. \tag{16}$$

Анализ уравнений (15) и (16) показывает, однако, что они имеют смысл лишь при $\delta < \Delta/(\sqrt{3}W_0)$, и поскольку в зарядово-упорядоченных слоистых кристаллах $\Delta < W_0$, в условиях яркой выраженности зарядового упорядочения, когда $\delta \approx 1$, частота $\omega_6$ при $-W_0\delta \le \xi \le W_0\delta$ является „магнитопробойной", особенно в веществах с высокими критическими температурами переходов.

При $W_0\delta \le \xi \le \Delta_\delta$ начинается заполнение верхней минизоны и появляется новый участок ПФ, целиком объемлющийся первым, поэтому новых частот осцилляций не возникает, но „магнитопробойными" являются только частота $\omega_1$ в сильных полях и $\omega_2$ и $\omega_3$ — в промежуточных полях. Однако если $\xi > (\Delta_\delta + W_0\delta)/2$, то частота $\omega_3$ связана с нестационарными сечениями ПФ плоскостями, перпендикулярными полю, уравнения которых имеют вид

$$k_z = \pm\arcsin\big((4\xi\Delta_\delta - 4\xi^2)^{\frac{1}{2}}/\Delta\big)/a, \tag{17}$$

$$k_z = \pm\big[\pi - \arcsin\big((4\xi\Delta_\delta - 4\xi^2)^{\frac{1}{2}}/\Delta\big)\big]/a. \tag{18}$$

При $\xi > \Delta_\delta$ в промежуточных полях наблюдаются только осцилляции с частотами $\omega_3, \omega_4, \omega_5$ и $\omega_6$, которые в данном случае связаны исключительно со стационарными сечениями ПФ плоскостями $k_z = 0$, $k_z = \pm\pi/a$ и $k_z = \pm\pi/2a$, а в сильных поях — еще и „магнитопробойные" осцилляции с частотой $\omega_1$.

Отметим, что условия $W_0\delta/\mu^*H < 1$ и $\Delta_\delta/\mu^*H < 1$, при которых наблюдаются осцилляции с частотой $\omega_1$, действительно есть условия „магнитного пробоя" между минизонами, поскольку $2W_0\delta$ — щель между ними, а $2\mu^*H$ — расстояние между соседними уровнями Ландау. Наблюдение же осцилляций с прочими „магнитопробойными" частотами можно связать с отражением электронов от границ зон Бриллюэна. Последнее в промежуточных полях, когда $W_0\delta/\mu^*H$ и $\Delta_\delta/\mu^*H$ не велики, но и не малы в сравнении с единицей, существенно потому, что „всплеск" электропроводности возникает не только при пересечении уровня Ферми уровнем Ландау, но и при проявлениях сингулярностей плотности состояний, т. е. при пересечении уровнем Ландау границ минизон. Однако при $\delta = 0$ амплитуды всех „магнитопробойных" осцилляций обращаются в нуль.

## Список литературы


[1] И.М. Лифшиц, А.М. Косевич. Изв. АН СССР. Сер. физ., **19**, 395 (1955).

[2] Н.Б. Брандт, С.М. Чудинов. *Электроны и фононы в металлах* (М., Изд-во МГУ, 1990).

[3] A.I. Chaikovskij, M.G. Shmelev, H.C. Quang. J. Phys. C: Sol. Phys., **10**, 3315 (1977).

[4] П.В. Горский. ФТП, **17**, 936 (1983).

[5] П.В. Горский. ФНТ, **12**, 584 (1986).

[6] J.M. Harper, T.H. Geballe. Phys. Lett. A, **54** (1), 27 (1975).

[7] C. Zeller, G.M.T. Foley, E.R. Falardeau, F.L. Vogel. Mater. Sci. Eng., **3** (1), 255 (1977).

[8] Э.А. Пашицкий, А.С. Шпигель. ФНТ, **4**, 976 (1978).

[9] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).

[10] Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Леш. *Специальные функции* (*формулы, графики, таблицы*) (М., Наука, 1968) с. 65.


*Редактор Л.В. Беляков*

## Classification of frequencies of the Shubnikov–de-Haas oscillations in crystals consisting of the charge–ordered layers under a magnetic breakdown

*P.V. Gorskyi*

Chernivtsi National University,
58000 Chernivtsi, Ukraine

**Abstract** The magnetic breakdown frequencies of the Shubnikov–de-Haas oscillations in the charge-ordered many–layer crystals have been observed. The „magnetic breakdown" oscillatory frequencies classification has been made.