

FERMI-SURFACES
AND ANOMALIES
OF METAL ELECTRON
CHARACTERISTICS
UNDER HIGH PRESSURE

E. S. ITSKEVICH

The Fermi-surface represents an effective way to describe the behavior of electrons in metals. The shape and peculiarities of Fermi-surface enable to interpret the metal properties such as conductivity of electricity and heat, their behavior in magnetic field. There is possible to affect the Fermi-surface and change it, for example, applying pressure and then metal properties are changed a great deal.

Ферми-поверхность – эффективный способ описания поведения электронов в металле. Форма и особенности поверхности Ферми объясняют такие свойства металлов, как проводимость электричества и тепла, поведение в магнитном поле. На поверхность Ферми можно воздействовать и изменять ее, например всесторонним сжатием. При этом меняются и свойства металла.

**ФЕРМИ-ПОВЕРХНОСТИ
И АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРОННЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛОВ
ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ**

Е. С. ИЦКЕВИЧ

Институт физики высоких давлений РАН,
Троицк Московской обл.

ВВЕДЕНИЕ

Множество людей считают, что они знают, что такое металл и каковы его свойства. При ответе на вопрос, что такое металл, практически каждый знает его основные признаки, такие, например, как электро- и теплопроводность. Физик должен ответить на вопрос, с какими особенностями структуры металла связаны эти свойства и можно ли их изменить. Для этого строится исходная модель металла – это совокупность положительно заряженных колеблющихся ионов и системы сравнительно свободных коллективизированных валентных электронов. Но можно определить металл и как твердое тело, обладающее ферми-поверхностью, это физическое определение отражает сущность металлических свойств. Понятие о поверхности Ферми – одно из основополагающих в квантовой механике, оно позволяет понять и объяснить основные физические свойства металла.

Но сначала немного истории. Немецкий физик Пауль Друде в 1900 году предложил модель металла в виде ящика, содержащего газ свободно движущихся электронов. Теория Друде объяснила многие свойства металлов: электрический ток как поток электронов, теплопроводность как перенос тепла этим же потоком. Но модель не смогла объяснить некоторые другие явления, главные из которых связаны с малостью энергии, необходимой для повышения температуры электронного газа по сравнению с предсказаниями теории. Скорости свободных электронов Друде, как и молекулы газа, должны быть распределены по статистике Л. Больцмана: при нагревании тепло поглощается всеми электронами, то есть должно было бы затрачиваться большое количество энергии.

Проблема была решена лишь с появлением и развитием квантовой механики. Физик из Швейцарии Вольфганг Паули в 1925 году сформулировал правило, согласно которому два электрона в системе не могут находиться в одном и том же состоянии (двигаться одинаковым образом). Если учесть, что каждый электрон обладает спином – моментом вращения, то не более двух электронов с противоположно

направленными спинами могут иметь одинаковые скорости и направление движения.

В 1926 году итальянский физик Энрико Ферми и английский Поль Дирак применили принцип запрета Паули к электронному газу. В их модели электроны последовательно заполняют состояния со все более высокой скоростью движения. Для описания этого явления оказалось удобным вести рассмотрение не в привычном физическом пространстве координат, а в пространстве скоростей. Координатами этого пространства являются проекции скорости на направления координатных осей. Точка в этом пространстве определяет величину и направление скорости. Граничная скорость называется скоростью Ферми — это граница занятых состояний. При абсолютном нуле температуры эта граница очень резкая. Электроны занимают самые нижние уровни энергии. В пространстве скоростей появляется поверхность (в простейшей модели это сфера) Ферми, определяющая границу занятых и незанятых состояний в электронном газе или энергию Ферми. Электроны низших состояний не могут изменить свою скорость, так как состояния, лежащие над ними, уже заняты. Подняться на незанятые состояния под воздействием нагрева могут только электроны на поверхности Ферми, количество которых существенно меньше, чем общее число электронов. В этом их отличие от идеального газа, где при нагреве дополнительная энергия поглощается сразу всеми молекулами.

1. СОВРЕМЕННАЯ ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

Однако и принцип Паули не все объяснял, так как не учитывал влияния на электронный газ положительных ионов кристаллической решетки металла. Взаимное отталкивание электронов также имеет место, но оно не меняет существенно их распределения по скоростям, то есть поверхность Ферми. Вследствие отталкивания электроны не подходят близко друг к другу. Экранирование электронов положительным зарядом решетки резко уменьшает силу отталкивания и делает редкими столкновения электронов. Влияние решетки изучил работавший в Швейцарии Феликс Блох (1928). Электростатическое взаимодействие с ионами меняет энергию электрона. Следовательно, поверхность Ферми в некоторых направлениях может отличаться от сферы. На рис. 1 это отражает пример для меди. Дальше мы дадим полное пояснение этих рисунков.

Но электрон имеет и волновые свойства, что приводит к дифракции этих волн на решетке ионов. Когда длина волны электрона равна целому числу расстояний между ионами в решетке, электрон рассеивается (отражается) подобно рентгеновским лучам в кристалле. Отраженные волны образуют две стоячие волны, по-разному взаимодействующие с ионами и поэтому имеющие разную энергию. Элек-

трон не может иметь промежуточную между этими значениями величину энергии. Это и есть запрещенная щель между областями разрешенных значений энергий электронов.

Решая уравнение Шрёдингера для электронов проводимости с учетом периодического расположения ионов и взаимодействия с ними, Блох получил решения, соответствующие описанной картине. В расчетах используется не скорость электрона, а пропорциональное ей волновое число, равное количеству волн, укладывающихся на расстоянии 2π см в направлении распространения волны. Длина волны электрона зависит от его импульса, связанного с волновым числом простым соотношением $\hbar k = p$, где \hbar — постоянная Планка, k и p — волновой вектор и импульс электрона соответственно. И обычно говорят о пространстве волновых векторов (импульсов) вместо пространства скоростей. Движение электрона описывается на основе установления связи его энергии с волновым числом $E(k)$, которая представляет собой закон дисперсии электронов проводимости.

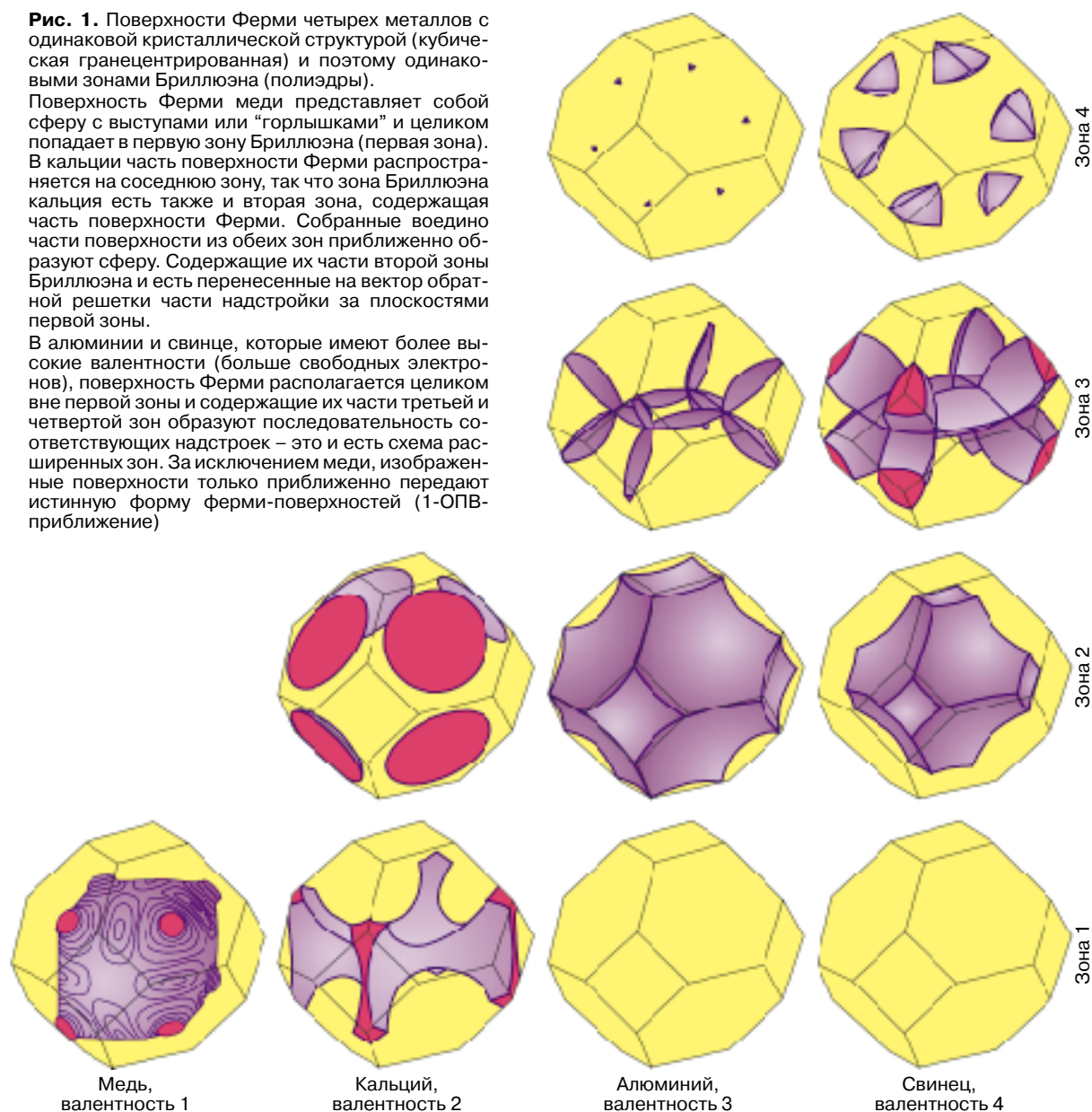
Искривление поверхности Ферми под влиянием решетки изменяет плотность разрешенных электронных состояний (число состояний на интервал энергии) вблизи нее, что воздействует на термодинамические и кинетические свойства металла. Позже мы дадим точное определение плотности состояний. Забегая вперед, можно указать, что и давление или односторонняя деформация также меняют эту плотность с теми же последствиями. Самое глубокое влияние на форму поверхности Ферми оказывают запрещенные энергетические зоны. Они хорошо видны на кривых, изображающих закон дисперсии $E(k)$. (Для свободного электрона это хорошо известная парабола $E = (\hbar k)^2 / (2m)$.) Для электрона проводимости на такой кривой можно показать, где находятся запрещенные щели (рис. 2).

Французский физик Луи Бриллюэн ввел понятие о зонах Бриллюэна, границы которых как раз и указывают расположение щелей. Первая зона Бриллюэна в пространстве k -векторов представляет собой многогранник (ячейка Вигнера—Зейтца), внутри которого энергия непрерывна (рис. 1) и плоскости которого (границы зоны) являются местом разрыва энергии. Вторая (и т.д.) зона Бриллюэна надстраивается по определенным правилам за этими плоскостями, и в ней тоже могут находиться части поверхности Ферми, и энергия опять непрерывна, как и следует из рис. 2. На этом же рисунке видно, что объем последующих зон Бриллюэна равен объему первой и их можно изображать так, как это сделано на рис. 1 (схема расширенных зон). Зоны Бриллюэна являются элементарными ячейками обратной решетки, они покрывают все пространство этой решетки, это схема повторяющихся зон, наиболее распространенная.

Рис. 1. Поверхности Ферми четырех металлов с одинаковой кристаллической структурой (кубическая гранецентрированная) и поэтому одинаковыми зонами Бриллюэна (полиэдры).

Поверхность Ферми меди представляет собой сферу с выступами или “горлышками” и целиком попадает в первую зону Бриллюэна (первая зона). В кальции часть поверхности Ферми распространяется на соседнюю зону, так что зона Бриллюэна кальция есть также и вторая зона, содержащая часть поверхности Ферми. Собранные воедино части поверхности из обеих зон приблизительно образуют сферу. Содержащие их части второй зоны Бриллюэна и есть перенесенные на вектор обратной решетки части надстройки за плоскостями первой зоны.

В алюминии и свинце, которые имеют более высокие валентности (больше свободных электронов), поверхность Ферми располагается целиком вне первой зоны и содержащие их части третьей и четвертой зон образуют последовательность соответствующих надстроек – это и есть схема расширенных зон. За исключением меди, изображенные поверхности только приблизительно передают истинную форму ферми-поверхностей (1-ОПВ-приближение)



Металлы характеризуются наличием электронов на разрешенных уровнях, примыкающих непрерывно к поверхности Ферми, им есть куда двигаться под действием электрического поля, поэтому они хорошо проводят электричество. Электропроводность металла и другие свойства определяются формой поверхности Ферми и длиной свободного пробега электронов на этой поверхности. Это же касается и внешних воздействий на металл, таких, как давление. Но прежде чем переходить к роли давления, следует еще кратко упомянуть о том, как развивались экспериментальные исследования поверхности Ферми металлов и какие модели используются для анализа экспериментов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ МЕТАЛЛОВ, В ТОМ ЧИСЛЕ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

С помощью различных тонких методов удалось исследовать поверхности Ферми в нормальных условиях для большинства металлов. Методы эти включают облучение электромагнитными волнами в микроволновом диапазоне и эффекты воздействия на металл сильных магнитных полей.

Для исследования под давлением наиболее приемлемы методы, позволяющие получать количественные данные о геометрии поверхности Ферми. Это связано со спецификой методики создания

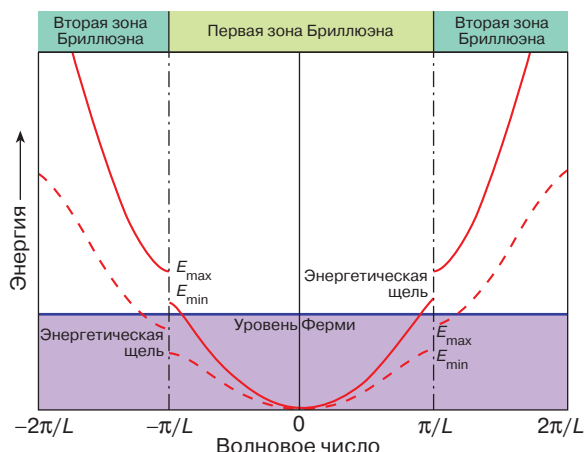


Рис. 2. Кривые зависимости энергии электрона от волновых чисел (закон дисперсии). Пространство волновых чисел, представляющее энергию в зависимости от волнового числа, более удобно для изображения движения электрона в решетке, чем пространство скоростей. Кривые изображены для электронов, перемещающихся в двух противоположных направлениях. Уровень Ферми указывает наивысшее энергетическое состояние, занимаемое электронами. Занятые состояния находятся ниже, незанятые — выше этого уровня. Волновое число, при котором кривая пересекает уровень Ферми, дает положение ферми-поверхности в данном направлении в пространстве волновых чисел. На рисунке часть поверхности лежит в первой зоне Бриллюэна, а часть — во второй. E_{\min} и E_{\max} находятся на границах зон Бриллюэна. Сплошные и штриховые линии соответствуют разным L , где L — расстояние между двумя ионами в направлении, по которому движется электрон. Так как по всем направлениям расстояния между граничными плоскостями в каждой зоне одинаковы, то одинаковы и их объемы. Можно видеть, как расширилась бы поверхность Ферми, если бы допустимые состояния выше уровня Ферми были заняты

статического давления, степени его гидростатичности и предельной величины. Поскольку измерения геометрии поверхности Ферми требуют больших времен релаксации для электронов, эксперименты ведутся при очень низких температурах (обычно для охлаждения металла используется жидкий гелий), на чистых и бездефектных кристаллах, в сильных магнитных полях.

Самым распространенным для работы под давлением оказалось использование квантовых осцилляций плотности состояний электронов в магнитном поле, дающих прямую информацию о поверхности Ферми — это эффекты де Хааза—ван Альфена и Шубникова—де Хааза (ДХВА и ШХ). В этом эксперименте охлажденный до температуры жидкого гелия металл помещается в сильное магнитное поле и измеряются намагнитченность или электросопротивление, вызываемые этим полем. Намагнитченность и электросопротивление периодичны по об-

ратному полю. Частота таких осцилляций пропорциональна площади поперечного сечения поверхности Ферми, перпендикулярного к направлению поля. Для большинства металлов оказалось, что определенная в эксперименте реальная поверхность Ферми не очень отличается от таковой для свободных электронов (рис. 1). Однако если эти отличия ведут к изменению ее топологии, то они могут кардинально изменять физические свойства металла. Кроме экспериментального отыскания возможных важных отличий была построена модель поверхности Ферми металла, способная помочь в анализе генезиса этих отличий и поиске их возникновения под давлением и при упругих деформациях.

3. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ПОВЕРХНОСТИ ФЕРМИ

Методом построения количественной модели является метод псевдопотенциала, разработанный американским физиком Уолтером Харрисоном в 60-х годах. Главное приближение метода — разделение всех электронных состояний на состояния внутренней оболочки и состояния электронов проводимости, причем первые считаются сильно локализованными (привязанными к ионам решетки), а вторые лежат выше последней заполненной оболочки. Вблизи ионов пренебрегают изменением потенциала взаимодействия с электронами за счет соседних ионов и электронов проводимости. Волновые функции электронов внутренних оболочек не перекрываются, они те же, что и у изолированных ионов. Кроме того, делаются еще два приближения: потенциал вычисляется самосогласованно, а внутри зоны Бриллюэна используется теория возмущений. Первое означает, что взаимодействие между электронами описывается средним потенциалом, который зависит от того, в каких состояниях находятся электроны; электронные состояния, в свою очередь, зависят от среднего потенциала. Второе означает разбиение волновых функций, являющихся решениями уравнения Шрёдингера, и собственных значений энергии электронов на основную часть, соответствующую решению без потенциала, и малую добавку, связанную с решеткой, — возмущение. Потенциал рассматривается сразу как возмущение.

Решение в рамках этой теории имеет вид ряда (и для волновой функции и для энергии). Главная задача метода состоит в том, чтобы найти достаточно просто собственные значения энергии $E(\mathbf{k})$ электронов проводимости (тем самым определить поверхность Ферми), в том числе на границах зоны Бриллюэна, и понять, почему электроны проводимости почти свободны несмотря на сильное кулоновское взаимодействие электрон — положительный ион, то есть обосновать теорию возмущений. Метод хорошо применим к одно-двухвалентным

металлам и металлам с незаполненными d -оболочками (см. Периодическую систему элементов Менделеева), у которых уровень Ферми проходит через s - и p -уровни, а волновые функции d -электронов не перекрываются.

Метод дает псевдоволновое уравнение с той же зависимостью $E(\mathbf{k})$, что и истинное волновое уравнение с заменой потенциала на псевдопотенциал W и псевдоволновой функцией $\phi(\mathbf{k}) = \sum a(\mathbf{k})|\mathbf{k} + \mathbf{q}\rangle$ — рядом, состоящим из суммы плоских волн, где \mathbf{q} — изменение волнового вектора за счет внешнего воздействия. Истинная волновая функция электронов проводимости выражается через эту сумму с учетом влияния электронов внутренних оболочек атома. Подставляя $\phi(\mathbf{k})$ в уравнение Шрёдингера с псевдопотенциалом W и используя ортогональность плоских волн, получаем систему линейных алгебраических уравнений, решение которых дает $E(\mathbf{k})$ и тем самым поверхность Ферми (ПФ).

Для сходимости ряда $\phi(\mathbf{k})$ оказывается достаточно небольшого числа плоских волн — членов ряда. Для получения ПФ на грани зоны Бриллюэна достаточно две плоские волны, для ребра — три и для угла — четыре. Для описания свойств металла, в которых определяющую роль играют электроны на ПФ, псевдопотенциал W можно считать зависящим только от вектора \mathbf{q} . Согласно модели свободных электронов (значение W близко к нулю), ПФ есть совокупность $i + 1$ пересекающихся сфер Ферми с центрами в эквивалентных точках в обратной решетке, состоящей из повторяющихся одинаковых зон Бриллюэна в \mathbf{k} -пространстве, называемой построением Харрисона. Оно определяется уравнением

$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(\mathbf{k}_F - \mathbf{g}_i)$, где E_F — энергия Ферми, \mathbf{k}_F — фермиевский волновой вектор, \mathbf{g}_i — вектор обратной решетки, \mathbf{k}_F определен кристаллической структурой и валентностью металла Z . Например, для грани зоны Бриллюэна прилегающая часть ПФ образуется при пересечении двух сфер радиуса \mathbf{k}_F с центрами на перпендикулярной грани прямой, отстоящими друг от друга на величину вектора обратной решетки \mathbf{g}_i .

Сегменты сфер, отсекаемые гранями зоны Бриллюэна и соседними сферами, образуют части поверхности Ферми, относящейся к той или иной зоне по следующему правилу: области, ограниченные частями ПФ отрицательной кривизны относительно внутреннего, заполненного электронами объема и принадлежащие одновременно n сферам, представляют собой дырочные части поверхности Ферми в $(n + 1)$ -й зоне; области, ограниченные частями ПФ положительной кривизны относительно внутреннего, заполненного электронами объема и принадлежащие одновременно n сферам, представляют собой электронные части ПФ в n -й зоне. Получающаяся ПФ называется одноволновой (1-ОПВ). Ее разновидности изображены на рис. 1.

Близкие к реальной ПФ получаются из одноволновой внесением поправок из-за конечности W , значительных вблизи граней зоны Бриллюэна, или если отсекаемые соседними сферами части ПФ малы.

4. ОБ АНОМАЛИЯХ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛЛОВ В ОБЛАСТИ БОЛЬШИХ ДАВЛЕНИЙ

Задача была сформулирована и решена в 60-х годах Ильей Лифшицем (Харьков). Электрон проводимости, как мы уже знаем, есть квазичастица со сложной периодической зависимостью энергии от волнового вектора (импульса) и от обычного электрона (в вакууме) отличается своим поведением в полях. Например, в магнитном поле некоторые электроны не вращаются вокруг направления поля, а уходят на бесконечность, совершают инфинитное движение, что связано с открытой поверхностью Ферми. Такую открытость можно представить, если соединить сферу Ферми с соседними сферами с помощью контактных отростков, а зоны Бриллюэна с этими соседними сферами представить в схеме повторяющихся зон. По этим отросткам и проходят траектории электронов при инфинитном движении в плоскостях, перпендикулярных направлению магнитного поля по фиксированным направлениям. В общем случае в \mathbf{k} -пространстве имеются особые точки, называемые критическими ($E_{кр}$). При $E = E_{кр}$ изоэнергетические поверхности, в частности и ПФ, меняют свою топологию, а плотность состояний электронов $n(E)$ имеет особенность (как и в точках E_{min} и E_{max} на рис. 2).

Изменение топологии может происходить в основном двумя способами: либо в некоторой точке \mathbf{k} -пространства при $E = E_{кр}$ появляется (исчезает) новая полость изоэнергетической поверхности (рис. 3, а), либо поверхность меняет свою связность: например, открытая поверхность распадается на ряд замкнутых (разрыв перемычек, рис. 3, б), тороидальная распадается на систему эллипсоидов (рис. 3, в). Частным случаем перехода типа исчезновения (появления) всей ПФ являются переходы металл—диэлектрик и диэлектрик—металл.

Теперь рассмотрим подробнее понятие плотности состояний электронов $n(E)$, необходимой, в частности, для расчета измеряемых физических характеристик электронов и использованной Лифшицем для вычислений изменений термодинамических потенциалов при аномалиях под давлением. Число состояний электронов в объеме кристалла, в s -зоне в элементе объема \mathbf{k} -пространства dn_k^s пропорционально элементу векторного пространства $d\mathbf{k}$. Если координатные поверхности в \mathbf{k} -пространстве совпадают с ПФ, состояния электрона характеризуются его положением на изоэнергетической поверхности $E_s(\mathbf{k}) = E$ и элемент объема равен $ds dE/v_s$, где ds — элемент площади этой поверхности, а v_s — модуль

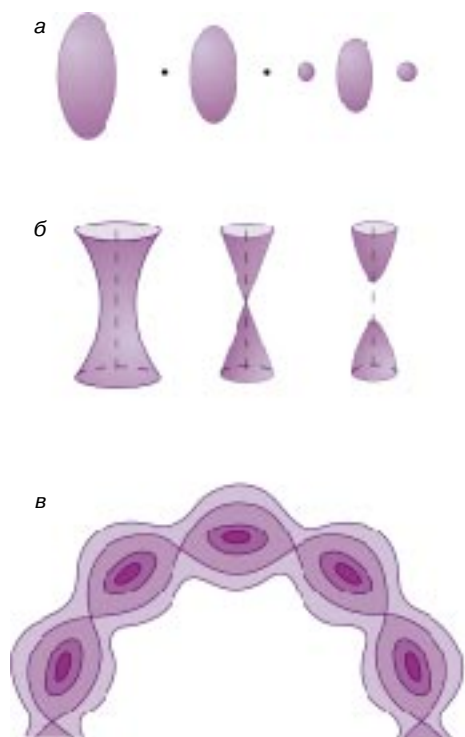


Рис. 3. Появление новой полости (а), разрыв перемычки (б) и переход системы гофрированных тороидов к эллипсоидам (в)

скорости электрона. Интегрируя по поверхности равной энергии $E_s(\mathbf{k}) = E$, получаем плотность состояний $n(E) = 2V/(2\pi\hbar)^3 \oint ds/v_s$. И для открытых и для замкнутых поверхностей интегрирование ведется в пределах одной зоны Бриллюэна. Можно без специальных предположений сделать заключения об особенностях функции $n(E)$ в интервале энергии $(E_0 - E_1)$, где $E_0 = E_{\min}$, а $E_1 = E_{\max}$. Вблизи этих экстремальных точек (рис. 3, а) изоэнергетические поверхности суть замкнутые эллипсоиды. Поэтому $n(E)$ имеет корневую зависимость от энергии вблизи E_{\min} и E_{\max} . Корневая особенность характерна для тех значений энергии, в которых изменяется топология изоэнергетических поверхностей.

Появление (исчезновение) полости может иметь место и в середине зоны при $E = E_{\text{кр}}$, тогда $n(E)$ при $E > E_{\text{кр}}$ имеет корневую особенность. При увеличении числа полостей в случае “разрывов” перемычек (рис. 3, б, в) изменение плотности состояний вычисляется аналогично и имеет корневую особенность, отличную от нуля при энергии, где число полостей больше. Лифшиц отметил, что, хотя значение $E_{\text{кр}}$ находится достаточно далеко от E_F , существует непрерывно меняющийся параметр, при изменении которого $E_F - E_{\text{кр}}$ проходит через нуль, а если можно изменить топологию граничной ПФ, то особеннос-

ти плотности состояний $n(E)$ приводят к аномалиям термодинамических и кинетических характеристик электронов в металле, а само изменение является фазовым переходом. В качестве такого параметра предлагается использовать давление. На рис. 4 изображен такой переход у гексагонального металла кадмия. Возможны и другие изменения топологии поверхности Ферми. Подчеркнем, что они не связаны с изменением симметрии решетки, поэтому не являются фазовым переходом 2-го рода.

Основой для анализа физических характеристик электронов проводимости в металле под давлением служат следующие соображения. Будем считать, что число поверхностей увеличивается при $E > E_{\text{кр}}$. Тогда у полного числа состояний при $E > E_{\text{кр}}$ появляется особенность в степени $3/2$ при $(E - E_{\text{кр}})$. Соответственно для термодинамического потенциала будет добавка за счет дополнительного числа состояний. Такие переходы, связанные с изменением топологии поверхности Ферми, можно назвать фазовым электронным переходом 2,5-го рода. Классификация связана с показателем степени $5/2$ при $(E_F - E_{\text{кр}})$ в выражении для термодинамического потенциала. При фазовых переходах 2,5-го рода у всех термодинамических и кинетических параметров, связанных с $n(E)$ металлов при $T = 0$ К, должны наблюдаться упомянутые особенности. Очевидно, что при $T > 0$ К особенности размываются. На кинетических характеристиках, кроме того, возможно появление особенностей, связанных с изменением движения (динамики) электронов при переходе через точку $E_F - E_{\text{кр}} = 0$, например при переходе от замкнутой поверхности Ферми к открытой. Таким образом, эксперимент, подтверждающий наличие фазовых переходов 2,5-го рода, является важным новым шагом в физике фазовых переходов.

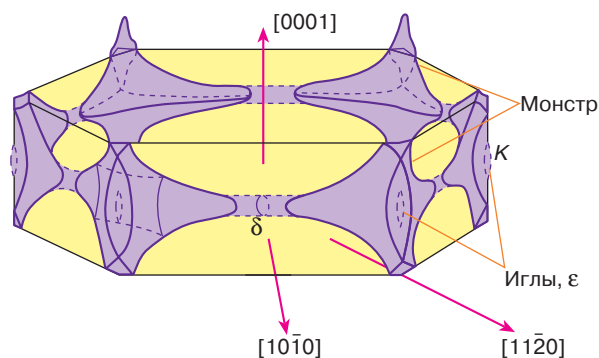


Рис. 4. Схематическое изображение поверхности Ферми кадмия. Открытая дырочная поверхность – монстр (вторая зона Бриллюэна). В базисной плоскости есть разрывы и не образуются открытые направления вдоль осей $[11\bar{2}0]$ и $[10\bar{1}0]$. В точках К нет “игл”. Штриховые линии изображают переходы у кадмия: возникновение перемычки (δ) и “иглы” (ϵ)

Эксперименты показали, что ПФ значительного числа металлов содержат тонкие перемишки, малые отщепленные полости и т.п. части ПФ. Можно ожидать, что изменения топологии, связанные с тонким строением ПФ, могут наблюдаться при небольших деформациях образцов. Основой для развития таких исследований явилась разработка новых методов генерации гидростатических давлений при низких температурах, позволяющих работать в сильных магнитных полях с совершенными монокристаллами и пленками (см. мою статью “Физика высоких давлений”: Соросовский Образовательный Журнал. 1997. № 9. С. 78–85).

При исследовании гальваномагнитных явлений и квантовых осцилляций под давлением были обнаружены следующие типы переходов 2,5-го рода: переходы, сопровождаемые появлением открытых электронных траекторий у кадмия при $P_{кр} \sim 2,0$ ГПа; переходы, сопровождаемые появлением или исчезновением изоэнергетических поверхностей у висмута, мышьяка, сплавов висмут–сурьма, в том числе при одноосных деформациях. Мы опишем более подробно экспериментальное наблюдение электронных фазовых переходов у цинка и кадмия как самых ранних и наиболее подробно изученных.

Кадмий и цинк – двухвалентные металлы (соседи по второй группе в Периодической системе элементов), обладающие гексагональной кристаллической решеткой. Решетки близки друг к другу отношениями параметров c/a : при $T = 4,2$ К для цинка $c/a = 1,831$, для кадмия $c/a = 1,863$, что обуславливает сильную анизотропию сжимаемости и существенное отличие от обычных ГПУ-металлов ($c/a \sim 1,67$), у которых нет малых частей ПФ (ГПУ-металлы – металлы с гексагональной плотной упаковкой). Из этих металлов можно приготовить совершенные и чистые монокристаллические образцы. При исследовании магнитосопротивления монокристаллов у цинка и кадмия (сильные поля и низкие температуры) обнаружилось кардинальное отличие их полевых зависимостей от направления магнитного поля. Это четко указывает на наличие разрывов в базисной плоскости ПФ кадмия в тонкой перемишке (открытая ПФ только вдоль оси c) и на отсутствие этих разрывов у цинка и наличие открытых ПФ вдоль обеих осей в базисной плоскости. Все эти результаты подтвердились измерениями осцилляций де Хааза–ван Альфена. Кроме того, в экспериментах у цинка обнаружилась “игла” – очень малая часть ПФ, которой у кадмия не было. Построение Харрисона показывало, что так и должно быть из-за небольшой разницы в отношениях c/a обоих металлов.

После разработки модуляционной техники измерения ДХВА-эффекта удалось провести измерения в кадмии под давлением до 3 ГПа. В спектре осцилляций были обнаружены две новые частоты, свидетельствующие о возникновении перемишки

(свидетельство ликвидации разрывов в базисной плоскости) и иглы у ПФ кадмия. На рис. 4 изображена ПФ кадмия, а на рис. 5 – новые частоты осцилляций, возникшие под давлением. Использование метода псевдопотенциала позволило качественно и количественно подтвердить эксперимент.

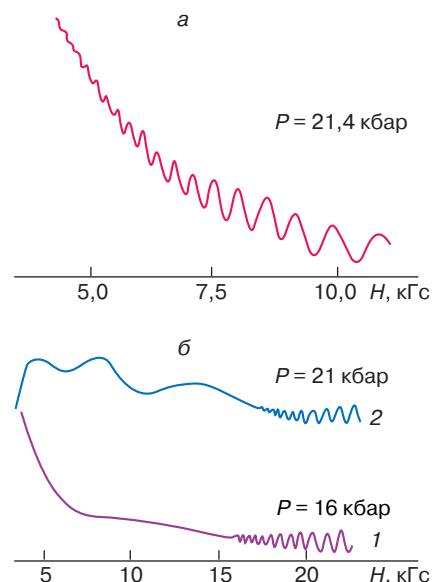


Рис. 5. ДХВА-осцилляции в кадмии, обусловленные новыми частями ПФ, возникающими при фазовых переходах 2,5-го рода: а – частота осцилляций при $H [11\bar{2}0]$; б – частота при $H [0001]$; 1 – до перехода, 2 – после перехода

5. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСТВО В МЕТАЛЛАХ И ЭЛЕКТРОННО-ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Так как при фазовом переходе 2,5-го рода появляется новая ветвь в электронной плотности состояний, то у всех кинетических явлений должны при этом наблюдаться особенности (см. раздел 4). Одним из наиболее чувствительных и сравнительно легких методов обнаружения таких явлений оказались исследования термо-ЭДС под давлением, реагирующие на различие типов переходов.

В Институте физики высоких давлений РАН проведены измерения температурных зависимостей продольной и поперечной термо-ЭДС кадмия в температурном интервале 4–300 К под давлением до 3 ГПа. До $P < 1,2$ ГПа кривые более или менее подобны друг другу, при $P > 2$ ГПа кривая термо-ЭДС имеет положительную аномалию знака. Наблюдается положительный всплеск величины термо-ЭДС, обусловленный переходом 2,5-го рода – возникновением дырочной перемишки. Аналогичные результаты получены при исследованиях

термо-ЭДС мышьяка, проведенные в Московском университете.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теория и экспериментальные исследования поверхности Ферми металлов под давлением позволили открыть электронные фазовые переходы 2,5-го рода и этим создать новое направление в физике твердого тела — изучение качественных изменений под давлением электронного спектра при помощи прямых измерений (спектроскопия давлением). Работы по фазовым переходам 2,5-го рода доказали не только их наличие, но и возможность их наблюдения под давлением с помощью исследования кинетических явлений, таких, как термо-ЭДС, когда условия для прямых наблюдений поверхности Ферми (хорошие монокристаллы, гидростатика) невозможно осуществить. Эти исследования получили еще более широкое распространение в физике полупроводников, одной из самых динамично развивающихся сегодня областей физики твердого тела. Полупроводники обладают большим числом малых параметров, использование которых при исследованиях под давлением очень перспективно.

Поверхности Ферми большинства обыкновенных металлов в настоящее время известны с доста-

точной степенью точности. Развито много методов исследования, в том числе и не описанных в настоящей статье. Металлы играют важную роль в современной науке и технике, и познание их фундаментальных свойств представляет и научный и прикладной интерес. Теория поверхности Ферми предопределила успех экспериментальных исследований, в результате которых получено много информации об электронных свойствах металлов. Это свидетельствует об успехах в нахождении достаточно простых закономерностей вместо кажущейся сложности и дисгармонии.

* * *

Ефим Соломонович Ицкевич, Соросовский профессор, доктор физико-математических наук, профессор Московского физико-технического института, заслуженный деятель науки РФ, главный научный сотрудник Института физики высоких давлений (Троицк Московской обл.). Область научных интересов — физика низких температур и высоких давлений. Автор 180 научных статей и открытия электронных фазовых переходов 2,5-го рода в металлах.