Физика низких температур, 1997, т. 23, № 1, с. 52–57

Поверхностная намагниченность металлов

С. С. Недорезов, Е. Ф. Рофе-Бекетова

Украинская инженерно-педагогическая академия, Украина, 310003, г. Харьков, ул. Университетская, 16
E-mail: docents@uenpa.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 10 июля 1996 г.

Поверхностная намагниченность металлов, обусловленная электронами с касающимися границы металла орбитами, исследована с учетом анизотропии энергетического спектра электронов проводимости. Показано, что угловая зависимость намагниченности имеет характерные особенности, определяемые кривизной поверхности Ферми в опорных точках. Получены явные выражения для поверхностной магнитной восприимчивости электронов в висмуте и сделаны соответствующие численные оценки ее величины.

Поверхневу намагніченість металів, яка обумовлена електронами з орбітами, що торкаються границі металу, досліджено з урахуванням анізотропії енергетичного спектра електронів провідності. Показано, що кутова залежність намагніченості має характерні особливості, які визначаються кривиною поверхні Фермі в опорних точках. Одержано явні вирази для поверхневої магнітної сприйнятливості електронів у вісмуті і зроблено відповідні чисельні оцінки її величини.

PACS: 75.20.-g,05.30.Fk,73.20-r

Введение

Вопрос о влиянии границы металла на диамагнитную восприимчивость электронов возник давно, по-существу уже в первых работах после создания Ландау теории диамагнетизма [1]. Дальнейшие исследования существенно связаны с представлением, согласно Лифшицу [2], электронов в металле как газа квазичастиц (электронов проводимости) с произвольным законом дисперсии. Работы Лифшица и Косевича [3–5] по теории эффекта де Гааза—ван Альфена и квантовым осцилляционным явлениям в металлах и металлических слоях определили (см. обзор [6]) теоретические и экспериментальные исследования квантовых магнитных и размерных эффектов в металлах.

Особое внимание потребовалось при изучении влияния границы металла на не осциллирующую с изменением магнитного поля H часть намагниченности электронов проводимости (литературу по данному вопросу см. в [7]). Если при вычислении квантовых осцилляций намагниченности достаточно квазиклассического приближения для квантовых энергетических уровней электронов проводимости в магнитном поле [4], то при вычислении плавной части намагниченности необходимы точные значения уровней энергии. В то же время при изучении вклада особых электронных орбит в поверхностную намагниченность металлов не применима термодинамическая теория возмущений по степеням H. Здесь весьма существенными (см. ниже) оказались результаты, полученные Лифшицем и Косевичем [8].

Термодинамические величины с учетом граничной поверхности металла можно представить суммой двух слагаемых, одно из которых пропорционально объему V, а второе — площади граничной поверхности S. Для магнитного момента электронов проводимости $\mathbf{M}$, таким образом, имеем

$$\mathbf{M} = V\mathbf{M}^{(v)} + S\mathbf{M}^{(s)}. \qquad (1)$$

Первое слагаемое в (1) связано с магнитными уровнями Ландау и определяется электронными орбитами вдали от границы металла (рис. 1,*а*), второе слагаемое — электронными орбитами вблизи границы металла (рис. 1,*б,в*).

Орбиты электронов, скачущих вдоль поверхности металла (рис. 1,*б*), обусловливают магнитные поверхностные уровни (МПУ), интерес к которым значительно возрос в связи с экспериментальным обнаружением Хайкиным [9] этих уровней [10]. Ранее вклад МПУ в намагниченность металлов исследовался в работах [8,11,12]. Используя квазиклассическое приближение для МПУ, в [11,12] для поверхностной части магнитного момента получена неаналитическая зависимость $M^{(s)}$ от H:

$$M^{(s)}_{\text{quasi}} \propto H^{-1/3}, \qquad (2)$$

© С. С. Недорезов, Е. Ф. Рофе-Бекетова, 1997

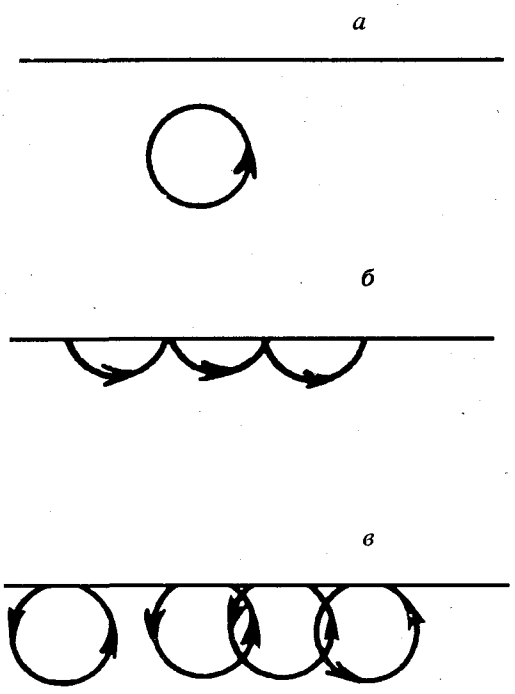

Рис. 1. Типы траекторий электронов проводимости в пластине в параллельном магнитном поле.

приводящая к сильной поверхностной намагниченности металлов в слабых магнитных полях.

Другой подход к задаче был указан Лифшицем и Косевичем [8]. Они показали, что при вычислении $M^{(s)}$ необходимо учитывать точные значения МПУ, так как $M^{(s)}$ существенно отличается от $M^{(s)}_{\text{quasi}}$. Согласно полученной в [13] оценке, $M^{(s)}/M^{(s)}_{\text{quasi}} < 0{,}1$. В [8] было высказано утверждение, вообще говоря, недоказанное, что в зависимости магнитного момента от H отсутствует особенность, описываемая формулой (2). В последующих работах вычисления $M^{(s)}$ в квазиклассическом приближении продолжались, пока одним из авторов настоящей работы указанная задача не была решена [14]. Для $M^{(s)}$ получено явное выражение с учетом точных значений МПУ, что позволило вычислить вклад МПУ в намагниченность металлов. Этот вклад действительно оказался равным нулю.

Как было показано в [15], поверхностная намагниченность металлов определяется электронами с орбитами, касающимися поверхности металла (рис. 1,*в*). Она имеет* корневую зависимость от магнитного поля H

$$M^{(s)} \propto H^{1/2} \qquad (3)$$

и значительно превышает обычные поверхностные поправки порядка $\lambda\!\!\!^{-}_F/L$, где $\lambda\!\!\!^{-}_F$ — фермиевская длина волны электрона; L — размер образца.

В настоящей работе поверхностная намагниченность металлов исследована с учетом анизотропии энергетического спектра электронов проводимости. Выполнен анализ угловой зависимости намагниченности от ориентации магнитного поля для эллипсоидальной поверхности Ферми (ПФ). Получены явные выражения для поверхностной магнитной восприимчивости электронов в висмуте и сделаны соответствующие численные оценки ее величины. Предсказываемые особенности в угловой зависимости поверхностной намагниченности определяются кривизной ПФ в опорных точках и обусловлены электронами проводимости с касающимися границы металла орбитами.

Поверхностная намагниченность электронов проводимости

Согласно [7], поверхностная намагниченность электронов с касающимися границы металла орбитами (рис. 1,*в*) определяется формулой

$$M^{(s)} = \frac{\beta}{2}\left(\frac{e}{c}\right)^{3/2}\left(\frac{H}{\hbar}\right)^{1/2}\sum_j \int_0^{\zeta} K_j^{3/4}(\varepsilon)\, k_j^{-1/2}(\varepsilon, \mathbf{N})\, d\varepsilon\,. \qquad (4)$$

Здесь $K_j(\varepsilon)$ — Гауссова кривизна изоэнергетической поверхности $E(\mathbf{p}) = \varepsilon$ в j-й опорной точке с нормалью, параллельной H (см. рис. 2); $k_j(\varepsilon, \mathbf{N})$ — кривизна перпендикулярного к N нормального сечения в j-й точке, вектор N перпендикулярен граничной поверхности металла. Магнитное поле H направлено параллельно границе металла. Энергия ε и химический потенциал ζ отсчитываются от дна соответствующей энергетической зоны.

* Полученная в [15] полевая зависимость поверхностной магнитной восприимчивости $\chi^{(s)} \propto H^{-1/2}$ и соответственно корневая зависимость $M^{(s)}$ от H ($\chi^{(s)} = \partial M^{(s)}/\partial H$) согласуется с результатами последующих вычислений магнитного момента, выполненных в [16] другим методом. Автор работы [16] вновь проанализировал вклад МПУ в намагниченность металлов. В рамках используемого метода ему не удалось получить точного выражения для коэффициента $C_{-1/6}$ при $H^{-1/3}$. Полученная им оценка сверху $|C_{-1/6}| < 0{,}002$ не противоречит нулевому результату [14].

Для числа β в (4) имеем [17]

$$\beta = \frac{3}{4\pi^4}\left\{\frac{2\sqrt{2}-1}{8}\zeta\left(\frac{5}{2}\right) + \frac{\pi^{1/6}}{2^{1/3}}\Gamma\left(\frac{5}{6}\right)\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\frac{1}{k^{11/6}}\times\right.$$

$$\left.\times\int_0^{\infty}\left[\cos\left(2\pi k\gamma(x)+\frac{\pi}{12}\right)+\cos\left(2\pi k\gamma(-x)+\frac{\pi}{12}\right)-\cos\left(\frac{\pi}{12}\right)\right]dx\right\} = 0{,}78\cdot10^{-2}, \qquad (5)$$

где функция $\gamma(x)$ определяется выражением

$$\gamma(x) = \pi^{-1}\,\mathrm{arctg}\left[Ai(x)/Bi(x)\right], \qquad (6)$$

$Ai(x)$ и $Bi(x)$ — функции Эйри первого и второго рода соответственно. В случае квадратичного изотропного закона дисперсии $E = p^2/2m$ из (4) следует

$$M^{(s)} = 2\beta\left(\frac{e}{c}\right)^{3/2}\left(\frac{\zeta}{2m\hbar}\right)^{1/2}H^{1/2}. \qquad (7)$$

Для анизотропного закона дисперсии

$$E(\mathbf{p}) = \frac{p_x^2}{2m_1}+\frac{p_y^2}{2m_2}+\frac{p_z^2}{2m_3}, \qquad (8)$$

вычисляя кривизну поверхности Ферми в опорных точках, получаем

$$M^{(s)} = 2\beta\left(\frac{e}{c}\right)^{3/2}\left(\frac{\zeta}{2\hbar\sqrt{m_1m_2m_3}}\right)^{1/2}\frac{|\mathbf{h}_m|^{5/2}}{|\mathbf{n}_m\times\mathbf{h}_m|}H^{1/2}, \qquad (9)$$

где

$$\mathbf{h}_m = \frac{1}{H}\left(H_x\sqrt{m_1}\,\mathbf{i}+H_y\sqrt{m_2}\,\mathbf{j}+H_z\sqrt{m_3}\,\mathbf{k}\right),$$

$$\mathbf{n}_m = N_x\sqrt{m_1}\,\mathbf{i}+N_y\sqrt{m_2}\,\mathbf{j}+N_z\sqrt{m_3}\,\mathbf{k}. \qquad (10)$$

Здесь нормаль к граничной поверхности металла **N** и напряженность магнитного поля **H** заданы в собственной системе координат разложения (8), причем $\mathbf{H}\perp\mathbf{N}$, $|\mathbf{N}| = 1$.

Из (4) следует, что поверхностная намагниченность определяется кривизной изоэнергетических поверхностей в опорных точках (рис. 2). Наибольший вклад в намагниченность вносят электроны проводимости вблизи опорных точек с наибольшей кривизной ПФ, что приводит к существенной анизотропии поверхностной намагниченности. Покажем это для эллипсоидальной ПФ, вытянутой вдоль оси X ($m_1 >> m_2, m_3$). Обозначив $m = m_1$, $\lambda = m_2/m_1$, $\mu = m_3/m_2$ и введя единичные векторы $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, $\mathbf{s} = \mathbf{h}\times\mathbf{N}$, из (9) получаем

$$M^{(s)} = 2\beta\left(\frac{e}{c}\right)^{3/2}\left(\frac{\zeta H}{2m\hbar}\right)^{1/2}\Phi(\varphi), \qquad (11)$$

где функция

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\lambda\mu^{1/4}}\left(h_x^2+\lambda(h_y^2+\mu h_z^2)\right)^{5/4}\times$$

$$\times\left(s_z^2+\mu s_y^2+\lambda\mu s_x^2\right)^{-1/2} \qquad (12)$$

определяет зависимость намагниченности $M^{(s)}$ от угла поворота φ магнитного поля **H**. В изотропном случае ($\lambda = \mu = 1$) $\Phi = 1$.

Анализ угловой зависимости $M^{(s)}$ приводит при сильной анизотропии ($\lambda << 1$) к следующим результатам. В направлении $\mathbf{h}_0$ ($\mathbf{h}_0 = \mathbf{i}\times\mathbf{N}$), перпен-

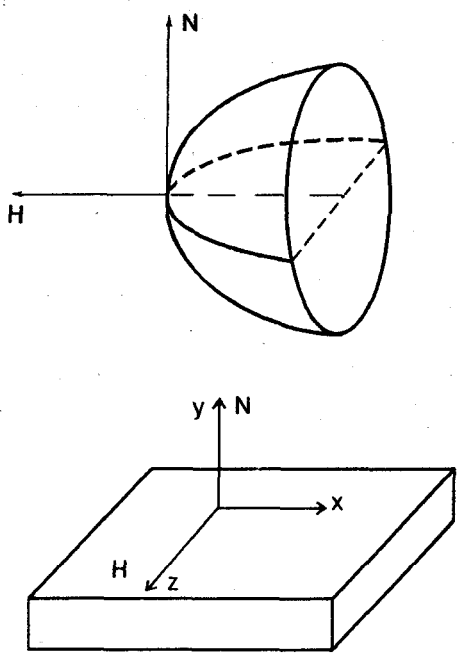

Рис. 2. Опорные точки поверхности Ферми, определяющие поверхностную намагниченность металлов.

дикулярном оси вытянутости ПФ (оси X), функция $\Phi(\varphi)$ принимает наименьшее значение

$$\Phi(0) = \left(\frac{\lambda}{\mu}\right)^{1/4}\left(N_z^2 + \mu N_y^2\right)^{5/4} \times$$

$$\times \left[N_x^2(N_z^2 + \mu N_y^2) + \lambda\mu(1 - N_x^2)^2\right]^{-1/2}. \quad (13)$$

Величина $\Phi(0)$ весьма чувствительна к γ — углу наклона оси X относительно границы металла ($N_x = \sin\gamma$), изменяясь от значения порядка $\lambda^{1/4}$ до величины $\sim\lambda^{-1/4}$ при $\gamma = 0$. Резкое увеличение $\Phi(0)$ в интервале углов $|\gamma| \sim \sqrt{\lambda}$ обусловлено уменьшением кривизны $k_j(\varepsilon, \mathrm{N})$ нормального сечения ПФ в опорных точках.

Направлению $\mathbf{h}_0$ соответствуют опорные точки ПФ с наименьшей кривизной. При отклонении H от направления $\mathbf{h}_0$ величина $\Phi(\varphi)$ резко увеличивается до значения $\sim\lambda^{-1}$. При малых углах наклона оси X ($\gamma < 1$) зависимость $\Phi(\varphi)$ определяется выражением

$$\Phi(\varphi) \approx \frac{|\sin\varphi|^{3/2}}{\lambda\mu^{1/4}}\left(N_y^2 + \mu N_z^2\right)^{-1/2}, \quad (14)$$

где φ — угол между H и $\mathbf{h}_0$. Максимальное значение $\Phi(\pi/2)$ функция $\Phi(\varphi)$ имеет в направлении, соответствующем опорным точкам ПФ с наибольшей кривизной. Формула (14) применима при $\varphi \neq 0$. В узком интервале углов $|\varphi| \sim \sqrt{\lambda} << 1$ значения $\Phi(\varphi)$ уменьшаются до величины $\Phi(0)$.

Вблизи направления $\mathbf{h}_0$ ($\varphi < 1$) и малых углах наклона оси X относительно границы металла ($\gamma < 1$) угловая зависимость поверхностной намагниченности весьма чувствительна к величине γ и определяется выражением

$$\Phi(\varphi) \approx \frac{1}{\lambda\mu^{1/4}}\left(\sin^2\varphi + \lambda(N_z^2 + \mu N_y^2)\right)^{5/4}\left[(N_y\sin\varphi + N_z\sin\gamma)^2 + \mu(N_z\sin\varphi - N_y\sin\gamma)^2 + \lambda\mu\right]^{-1/2}. \quad (15)$$

При $|\sin\varphi| > \sqrt{\lambda}$, $|\sin\gamma|$ формула (15) совпадает с (14) и описывает резкое убывание поверхностной намагниченности в интервале углов $|\varphi| \sim \sqrt{\lambda}$ (рис. 3).

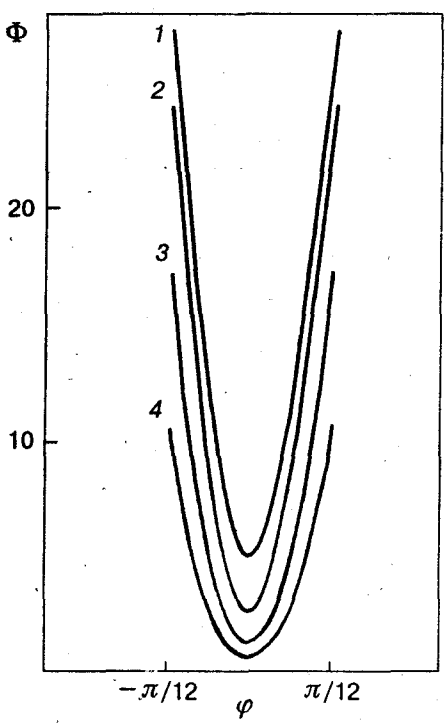

Рис. 3. Угловая зависимость $\Phi(\varphi)$ поверхностной намагниченности металлов в случае сильной анизотропии поверхности Ферми ($\lambda \approx 4{,}503\cdot10^{-3}$, $\cos\varphi = \mathbf{h}_0\mathbf{h}$, $N_z = 0$, $N_x = \sin\gamma$) при $\gamma = 0$ (*1*); 6°23′ (*2*); 15° (*3*); 30° (*4*).

Из проведенного анализа следует, что анизотропия электронного энергетического спектра существенно проявляется в угловой зависимости поверхностной намагниченности. Характерная зависимость $M^{(s)}$ от угла φ наряду с ее полевой зависимостью ($\sim\sqrt{H}$) может оказаться полезной при экспериментальном исследовании намагниченности электронов проводимости с орбитами, касающимися границы металла. Рассмотренная модель ПФ непосредственно применима для вычисления поверхностной намагниченности электронов проводимости в малых группах, например электронов в полуметалле.

Поверхностная магнитная восприимчивость электронов в висмуте

Исходя из известного (см. обзор [18]) энергетического спектра электронов в висмуте и вычисляя $M^{(s)}$ по формуле (9), для поверхностной магнитной восприимчивости ($\chi^{(s)} = \partial M^{(s)}/\partial H$) получаем

$$\chi^{(s)} = \beta\left(\frac{e}{c}\right)^{3/2}\left(\frac{\zeta}{2m\hbar}\right)^{1/2} H^{-1/2}F(\varphi), \quad (16)$$

где функция $F(\varphi)$ определяется формой образца и существенно зависит от ориентации магнитного поля. Приведем результаты вычисления $\chi^{(s)}$ для

пластины с нормалью **N**, параллельной соответственно тригональной (C_3), бисекторной (C_1) и бинарной (C_2) кристаллографическим осям висмута. Угол φ определяет направление **H** в плоскости пластины.

1. $\mathbf{N} \parallel C_3$.

$$F(\varphi) = \frac{1}{\lambda\mu^{1/4}} \sum_{k=0}^{2} \frac{\left[\alpha_c \cos^2(\varphi + 2\pi k/3) + \lambda \sin^2(\varphi + 2\pi k/3)\right]^{5/4}}{\left[\alpha_s \sin^2(\varphi + 2\pi k/3) + \mu \cos^2(\varphi + 2\pi k/3)\right]^{1/2}}, \tag{17}$$

где φ — угол между осью C_1 и **H**,

$$\alpha_c = \cos^2\alpha + \lambda\mu \sin^2\alpha, \qquad \alpha_s = \sin^2\alpha + \lambda\mu \cos^2\alpha, \tag{18}$$

α — угол наклона главной оси эллипсоида относительно оси C_1; $\lambda = m_2/m_1$; $\mu = m_3/m_2$; $m = m_1$. В изотропном случае ($\lambda = \mu = 1$) $F(\varphi) = 3$, т.е. числу электронных эллипсоидов в висмуте.

2. $\mathbf{N} \parallel C_1$.

$$F(\varphi) = \frac{1}{\lambda\mu^{1/4}} \sum_{k=0}^{2} \frac{\left(\alpha_s \cos^2\varphi + \beta_k(\lambda, \alpha_c) \sin^2\varphi + \delta\gamma_k \sin 2\varphi\right)^{5/4}}{\left(\alpha_c \sin^2\varphi + \beta_k(\mu, \alpha_s) \cos^2\varphi + \delta\gamma_k \sin 2\varphi\right)^{1/2}}, \tag{19}$$

где $\delta = 1/4\,(1 - \lambda\mu) \sin 2\alpha$;

$$\beta_k(x, y) = \begin{cases} x, & k = 0 \\ \frac{1}{4}(x + 3y), & k = 1,2; \end{cases}$$

$$\gamma_k = \begin{cases} 0, & k = 0 \\ (-1)^k \sqrt{3}, & k = 1,2. \end{cases} \tag{20}$$

Угол поворота магнитного поля **H** в плоскости пластины отсчитывается от оси C_3.

3. $\mathbf{N} \parallel C_2$.

Угловая зависимость $F(\varphi)$ в данном случае определяется формулой (19) при замене $\beta_k(\lambda, \alpha_c)$ на $\beta_k(\alpha_c, \lambda)$, $\beta_k(\mu, \alpha_s)$ на $\beta_k(\alpha_s, \mu)$ и γ_k на

$$\gamma_k = \begin{cases} 2, & k = 0 \\ -1, & k = 1,2. \end{cases} \tag{21}$$

При этом два последних слагаемых в (19) совпадают, что обусловлено эквивалентностью двух эллипсоидов относительно границы пластины.

Результаты вычисления $F(\varphi)$, определяющей угловую зависимость поверхностной магнитной восприимчивости $\chi^{(s)}$, представлены на рис. 4. Для параметров λ, μ и α, согласно экспериментальным данным о ПФ в висмуте [18], выбраны следующие значения: $\lambda = 4{,}503 \cdot 10^{-3}$, $\mu = 1{,}7355$, $\alpha = 6°23'$.

Вклады отдельных эллипсоидов (см. рис. 4,*б*) имеют четко выраженный анизотропный характер с провалом в направлении минимальных значений кривизны ПФ в опорных точках. При $\mathbf{N} \parallel C_3$ суммирование по эллипсоидам приводит к сглаживанию указанных особенностей (см. рис. 4,*а*). Иной характер угловой зависимости $F(\varphi)$ получается при $\mathbf{N} \parallel C_1$, C_2. В этих случаях не происходит сглаживания особенностей и функция $F(\varphi)$ имеет резкий провал в направлении оси C_3. Это связано с разной ролью эллипсоидов в формировании $F(\varphi)$, особенно при $\mathbf{N} \parallel C_1$, когда вкладом первого эллипсоида (см. рис. 4,*б*) можно пренебречь.

В слабых магнитных полях полевая зависимость магнитной восприимчивости пластины $\chi(H)$ определяется ее поверхностной частью $\chi^{(s)} \propto H^{-1/2}$ (см. (16)). Для пластины с нормалью $\mathbf{N} \parallel C_3$ относительное изменение угловой функции $F(\varphi)$ невелико и можно использовать любую ориентацию магнитного поля **H** в плоскости пластины. В случаях $\mathbf{N} \parallel C_1$ и $\mathbf{N} \parallel C_2$ функция $F(\varphi)$ имеет наибольшие значения в направлениях C_2 и C_1 соответственно, что следует учитывать при выборе ориентации **H**.

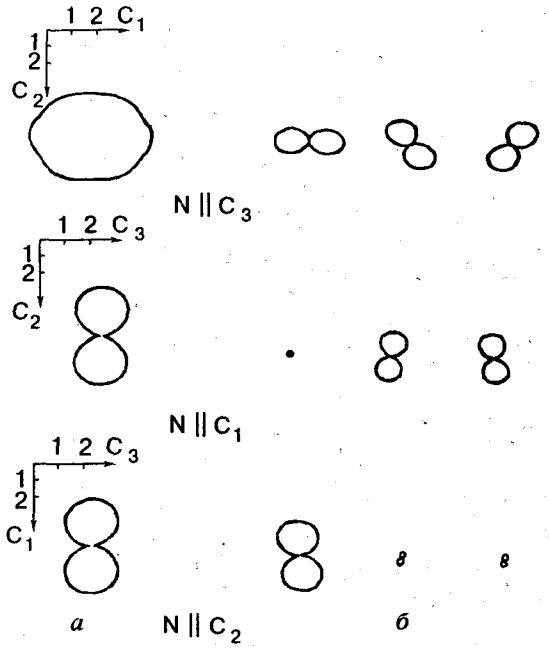

Рис. 4. Угловая зависимость $F(\varphi)$ поверхностной магнитной восприимчивости электронов в висмуте: *а* — суммарный вклад, *б* — вклады отдельных электронных эллипсоидов.

Полученная угловая зависимость $\chi^{(s)}(\varphi)$ (рис. 4) обусловлена электронами проводимости с касающимися границы металла орбитами. Экспериментальное обнаружение указанной зависимости $\chi^{(s)}$ от угла φ наряду с ее полевой зависимостью может служить подтверждением существования рассматриваемых электронных состояний. Кроме того, изучение угловой зависимости магнитной восприимчивости может дать детальную информацию об электронном энергетическом спектре металлов.

В заключение выражаем благодарность редакции журнала ФНТ за издание юбилейного выпуска, посвященного памяти Ильи Михайловича Лифшица и предоставленную нам возможность участия в этом выпуске. Это особенно важно для одного из нас (С.Н.), чья научная работа, начиная с аспирантуры и кончая докторской диссертацией, выполнялась под непосредственным влиянием и руководством Ильи Михайловича.

1. L. D. Landau, *Z. Phys.* **64**, 629 (1930).
2. И. М. Лифшиц, М. Я. Азбель, М. И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
3. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *Изв. АН СССР*, серия физич. 19, 395 (1955).
4. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *ЖЭТФ* **29**, 730 (1955).
5. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *ЖЭТФ* **29**, 743 (1955).
6. А. С. Кондратьев, С. С. Недорезов, В. Г. Песчанский, *ФММ* **5**, 5 (1991).
7. С. С. Недорезов, *ЖЭТФ* **64**, 624 (1973).
8. И. М. Лифшиц, А. М. Косевич, *ДАН СССР* **91**, 795 (1953).
9. М. С. Хайкин, *ЖЭТФ* **39**, 212 (1960).
10. T. W. Nee and R. E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* **25A**, 582 (1967).
11. M. C. Steel, *Phys. Rev.* **88**, 451 (1952).
12. R. B. Dingle, *Proc. Roy. Soc.* **A219**, 463 (1953).
13. А. М. Косевич, *Дис... канд. физ.-мат. наук*, Харьков (1953).
14. С. С. Недорезов, *ЖЭТФ* **60**, 1938 (1971).
15. С. С. Недорезов, *Письма в ЖЭТФ* **14**, 597 (1971).
16. F. Shishido, *Phys. Rev. Lett.* **152A**, 443 (1991).
17. С. С. Недорезов, *ФНТ* **6**, 924 (1980).
18. В. С. Эдельман, *УФН* **123**, 257 (1977).

Surface magnetization of metals

S. S. Nedorezov and E. F. Rofe-Beketova

Surface magnetization of metals stipulated by electrons with orbits which are tangent to the metal boundary is investigated with regard for anisotropy of energy spectrum of conduction electrons. It is shown that the angular dependence of magnetization has distinguishing features defined by the Fermi surface curvature at the points of support. Explicit expressions for surface magnetic susceptibility of electrons in bismuth are derived and appropriate numerical estimations of its value are made.