Температурная зависимость магнитной восприимчивости в полупроводниках А⁴В⁶

© Б.А. Волков, О.М. Ручайский

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 117924 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 2 апреля 1997 г. В окончательной редакции 7 июля 1997 г.)

Рассматривается магнитная восприимчивость полупроводников IV–VI с квазирелятивистским электронным спектром.

В соединениях A^4B^6 в силу специфики их зонной структуры [1] достаточно часто можно ограничиться исследованием вклада в те или иные характеристики только электронов из малой окрестности запрещенной зоны (такие электроны описываются уравнением типа Дирака [2]), считая вклад остальных зонных электронов постоянным. Исследование магнитных свойств подобных соединений [3], в частности PbTe(Ga), приводит к задаче о магнитной восприимчивости дираковского газа свободных электронов. Впрочем, такая задача интересна и сама по себе, так как позволяет проследить, например, влияние на магнитный отклик межзонных переходов, ограниченности спектра, его анизотропии, оценить вклад примесей в магнитную восприимчивость.

1. Общая постановка задачи

Невозмущенный гамильтониан имеет следующий вид:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\alpha}_i v_{ij} \hat{p}_j + \beta \Delta,$$

или в развернутой матричной форме

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \begin{pmatrix} \Delta & \hat{\sigma}_i v_{ij} \hat{p}_j \\ \hat{\sigma}_i v_{ij} \hat{p}_j & -\Delta \end{pmatrix}.$$
 (1)

Здесь $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — матрицы Паули, $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$ (везде в промежуточных формулах $\hbar = 1$), $\Delta = (1/2)\varepsilon_g$ полуширина запрещенной зоны, v_{ij} — тензор матричного элемента межзонного перехода. Для простоты пока рассматривается изотропный случай, когда тензор может быть представлен в виде $v_{ij} = v\delta_{ij}$. Магнитное поле включается в гамильтониан обычным калибровочно инвариантным способом

$$\hat{\mathcal{H}}_{0} = \begin{pmatrix} \Delta & v\sigma(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}) \\ v\hat{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} & -\Delta \end{pmatrix}.$$
 (2)

Обычным образом вводя оператор плотности тока

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{\delta \hat{\mathcal{H}}}{\delta \mathbf{A}} = ev \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma} \\ \hat{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad (3)$$

можно переписать формулу (2) в виде

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V} = \hat{\mathcal{H}}_0 - \frac{1}{c}\hat{\mathbf{J}}\mathbf{A}.$$
(4)

Среднее значение оператора (3) определяется при помощи матрицы плотности

$$\langle \hat{\mathbf{J}}(x) \rangle = \operatorname{Sp}(\hat{\mathbf{J}}\hat{\rho}),$$
 (5)

а матрица плотности получается из функции Грина уравнения Шредингера во внешнем поле

$$\hat{\rho}(x,x') = \oint_C \frac{d\omega}{2\pi i} \hat{G}_{\omega}(x,x').$$
(6)

Здесь интегрирование ведется вдоль действительной оси ω , контур *C* охватывает только занятые состояния. Среднее значение оператора плотности тока связано с полем через функцию отклика Q_{ij}

$$\langle \hat{\mathbf{J}}(x) \rangle_i = \int d^3 x' Q_{ij}(x - x') A_j(x'), \tag{7}$$

 $\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle_i$ — *i*-я компонента вектора $\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle$. В дальнейшем в силу изотропии тензора скоростей v_{ij} везде будет полагаться $Q_{ij} = \delta_{ij}Q$. Переход в (7) к Фурье-компонентам дает

$$\mathbf{j}_{\mathbf{q}} = \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \langle \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{x}) \rangle = Q(\mathbf{q}) \mathbf{A}_{\mathbf{q}},$$
 (8)

Здесь A_q — Фурье-компоненты поля А. В рассматриваемой системе свободная функция Грина определяется уравнением

$$\hat{G}^{(0)}_{\omega}(\mathbf{p}) = \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{p})} \begin{pmatrix} \omega + \Delta & v(\hat{\sigma}\mathbf{p}) \\ v(\hat{\sigma}\mathbf{p}) & \omega - \Delta \end{pmatrix}, \qquad (9)$$

 $\varepsilon({\bf p}) = \sqrt{\Delta^2 + v^2 {\bf p}^2} - закон дисперсии. Для функции Грина во внешнем поле$ **A**можно записать с учетом (4)

$$\hat{G}_{\omega}(\mathbf{p}) \simeq \hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) + \hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p})\hat{V}\hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p})$$
(10)

(для нахождения отклика на слабое поле достаточно знать функцию Грина в первом порядке по **A**). Матрица плотности, определяемая первым слагаемым формулы (10), является матрицей плотности системы в отсутствие поля и не вносит вклада в среднее оператора плотности тока. Таким образом, (7) с учетом (10) приобретает вид

$$\langle \hat{\mathbf{J}} \rangle = \oint_{C} \frac{d\omega}{2\pi i} \operatorname{Sp} \left(\hat{\mathbf{J}} \hat{G}_{\omega}^{(0)} \hat{V} \hat{G}_{\omega}^{(0)} \right).$$
(11)

Переходя в (11) к Фурье-компонентам, с учетом (4) и (8) получаем выражение для Q (**n** — единичный вектор в направлении поля **A**)

$$Q(\mathbf{q}) = -\frac{1}{c} \oint_{C} \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \operatorname{Sp} \times \left((\hat{\mathbf{J}}, \mathbf{n}) \hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p}) (\hat{\mathbf{J}}, \mathbf{n}) \hat{G}_{\omega}^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \right).$$
(12)

В уравнении (12) шпур берется только по "спинорным" индексам — индексам четырехрядных матриц (см. (1)). Удобно перейти к представлению функции Грина (9). Тогда с учетом (3)

$$Q_1(\mathbf{q}) = -\frac{e^2 v^2}{c} \oint_C \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \operatorname{Sp} \times \left((\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \hat{G}_{11}(\mathbf{p}) (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \hat{G}_{22}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \right),$$

$$Q_{2}(\mathbf{q}) = -\frac{e^{2}v^{2}}{c} \oint_{C} \frac{d\omega}{2\pi i} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \operatorname{Sp} \times \left((\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \hat{G}_{12}(\mathbf{p}) (\hat{\sigma}, \mathbf{n}) \hat{G}_{21}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \right), \quad (13)$$

В (13) через G_{AB} обозначены элементы матрицы (9), (A, B = 1, 2) (каждый такой элемент в свою очередь является матрицей 2×2), шпур берется только по индексам этих матриц — "спиновым" индексам, а полная функция отклика

$$Q(\mathbf{q}) = 2\big((Q_1(\mathbf{q}) + Q_2(\mathbf{q}))\big). \tag{14}$$

Прежде чем переходить к конкретным вычислениям, следует заметить следующее. Для определения статической магнитной восприимчивости χ_0 достаточно знать $Q(\mathbf{q})$ с точностью до величины порядка q^2 . Действительно, используя связь тока **j** с намагниченностью образца **M**, **j** = c rot **M**, а также формулу **H** = rot **A** и (8), легко получить

$$\chi_0 = \lim_{\mathbf{k} \to 0} \left(\frac{Q_{\mathbf{k}}}{ck^2} \right). \tag{15}$$

2. Вычисление восприимчивости при $\mu = 0$

Для начала удобно определить величину восприимчивости при нулевой температуре и "половинном" заполнении (химический потенциал лежит внутри запрещенной зоны). При этом контур интегрирования *C* в (6) охватывает только состояния нижней зоны, т.е. $-\infty < \omega < -\Delta$. В соответствии с (14) вычисление ($Q(\mathbf{q})$ разбивается на

два этапа.

$$Q_{1}(\mathbf{q}) = -\frac{e^{2}v^{2}}{c} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \\ \times \oint_{C} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{2(\omega^{2} - \Delta^{2})}{(\omega^{2} - \varepsilon^{2}(\mathbf{p}))(\omega^{2} - \varepsilon^{2}(\mathbf{p} + \mathbf{q}))} \\ = \frac{e^{2}v^{2}}{4\pi^{2}cq} \int dp \left[\frac{p(\varepsilon_{+} - \varepsilon_{-}}{v^{2}} - \frac{p^{3}}{\varepsilon_{p}} \ln \left| \frac{\varepsilon_{p} + \varepsilon_{+}}{\varepsilon_{p} + \varepsilon_{-}} \right| \right].$$
(16)

Здесь $p = |\mathbf{p}|, q = |\mathbf{q}|$ (в последнем равенстве в (16) интегрирование ведется по абсолютной величине импульса \mathbf{p}), $\varepsilon_{\pm} = \sqrt{\Delta^2 + v^2(p \pm q)^2}, \varepsilon_p = \sqrt{\Delta^2 + v^2 p^2}$. Двойка в числителе подынтегрального выражения первой формулы происходит из шпура двухрядной единичной матрицы. Вычисление $Q_2(\mathbf{q})$ более сложно, так как это слагаемое зависит от взаимной ориентации векторов \mathbf{q} и \mathbf{n} . Раскрывая шпур четырех σ -матриц, можно получить

$$Q_{2}(\mathbf{q}) = -\frac{e^{2}v^{4}}{c} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \times \frac{\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{n})}{(\varepsilon(\mathbf{p}) + \varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q}))\varepsilon(\mathbf{p})\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q})}.$$
 (17)

Функция $\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{n})$ определяется следующим образом:

$$\Omega(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{n}) = \begin{cases} 2p_x^2 - p^2 - p_z q, & \mathbf{n} \perp \mathbf{q}, \\ 2p_z^2 - p^2 + p_z q, & \mathbf{n} \parallel \mathbf{q}. \end{cases}$$

Здесь вектор **q** направлен вдоль оси *z*, а направление **n** в первой строке выбрано вдоль оси **x**. В силу того что физический смысл имеет поперечная часть векторпотенциала, $Q_2^{\parallel} \equiv 0$. Для дальнейших вычислений удобно перенормировать отклик $Q(\mathbf{q})$ следующим образом:

$$Q(\mathbf{q}) \rightarrow \tilde{Q}(\mathbf{q}) = Q_{\perp} + \frac{1}{2}Q_{\parallel}.$$
 (18)

Переобозначая величину $\Delta \rightarrow v\Delta$, из (17) получим

$$Q_{2}(q) = \frac{e^{2}v}{8\pi^{2}c} \int dp \left[\frac{p^{2}}{\varepsilon_{p}} - \frac{p(\varepsilon_{+} - \varepsilon_{-})}{q} + \frac{p}{q\varepsilon_{p}} \left(p^{2} - \frac{q^{2}}{2} \right) \ln \left| \frac{\varepsilon_{p} + \varepsilon_{+}}{\varepsilon_{p} + \varepsilon_{-}} \right| \right].$$
(19)

При перенормировке (18) $Q_1(\mathbf{q}) \rightarrow \tilde{Q}_1(\mathbf{q}) = (3/2)Q_1(\mathbf{q})$, так как $Q_1(\mathbf{q})$ не зависит от взаимного направления \mathbf{q} и **n**. Следует еще отметить, что вектор-потенциал $\mathbf{A} = \text{const}$ также не создает тока, т.е. $\tilde{Q}(0) \equiv 0$, поэтому в дальнейшем все слагаемые, не содержащие q, будут отбрасываться. Для $\tilde{Q}(q)$ окончательно получаем

$$\tilde{Q}(q) = 2\left(\frac{e^2v}{8\pi^2c}\right)\int_0^\infty dp \left[\frac{5p(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)}{2q} - \frac{2p^3}{q\varepsilon_p}\ln\left|\frac{\varepsilon_p + \varepsilon_+}{\varepsilon_p + \varepsilon_-}\right| - \frac{pq}{2\varepsilon_p}\ln\left|\frac{\varepsilon_p + \varepsilon_+}{\varepsilon_p + \varepsilon_-}\right|\right].$$
 (20)

Как уже упоминалось ранее, достаточно знать фукнцию отклика во втором порядке по q (см. (15)). Разложение подынтегрального логарифма до $O(q^5)$ дает для (20) следующий результат:

$$\tilde{Q}(q) = -2\frac{e^2 v q^2}{8\pi^2 c} \int_0^\infty dp \left[\frac{p^2}{2\varepsilon_p^3} + \frac{p^3}{3\varepsilon_p} \left(\frac{3p^3}{2\varepsilon_p^6} - \frac{p}{\varepsilon_p^4} \right) \right]$$
$$\simeq -\frac{e^2 v q^2}{6\pi^2 c} \ln \frac{\Delta v}{\Delta} \tag{21}$$

(все слагаемые в этом выражении расходятся как ln *p* при $p \to \infty$, подынтегральное слагаемое в (20), содержащее $p(\varepsilon_+ - \varepsilon_-)$, дает члены, сходящиеся при $p \to \infty$, поэтому в (21) оно опущено, для устранения расходимости интеграл по *p* в (21) обрезается на некоторой большой величине Λ). Отсюда с учетом (15) получается восприимчивость (в окончательной формуле восстановлена \hbar)

$$\chi = -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Lambda v}{\Delta} = -\frac{\alpha}{6\pi^2} \frac{v}{c} \ln \frac{\Lambda v}{\Delta}, \qquad (22)$$

где $\alpha = e^2/\hbar c$ — постоянная тонкой структуры. С точностью до логарифма, данное выражение напоминает известную формулу для восприимчивости Ландау

$$\chi_L = -rac{e^2 v_F}{12\pi^2 c^2 \hbar} = -rac{e^2 p_F}{12\pi^2 c^2 \hbar m}.$$

Результат (22) согласуется с аналогичным, полученным в [4]. Считая величину Λv порядка масштаба атомной энергии, отношение v/c порядка 10^{-2} , для χ получаем оценку порядка 10^{-5} , что значительно превосходит восприимчивость обычных материалов, составляющую $\sim 10^{-6}$.

3. Вычисление отклика при произвольном заполнении

Заполнение описывается химическим потенциалом μ либо соответствующим ему импульсом $(|\mu| = \sqrt{\Delta^2 + v^2 p_0^2})$. Удобно разбить величину отклика на две составляющие: $\chi = \chi^{(0)} + \delta \chi$. Здесь $\chi^{(0)}$ — восприимчивость (22), соответствующая $\mu = 0$, а δ*χ* — вклад, связанный с ненулевым *μ*. Величина $\delta \chi$ определяется так же, как и в предыдущем разделе (см. (12)), но только интегрирование ведется по занятым состояниям, описываемым формулой $\Delta < |\omega| < |\mu|$. Заранее очевидно, что результат не будет зависеть от знака μ , поэтому везде в дальнейшем μ считается положительным. Для вклада в функцию отклика, соответствующего $\delta \chi$, получается

$$\delta Q(\mathbf{q}) = 2(\delta Q_1(\mathbf{q}) + \delta Q_2(\mathbf{q}))$$

Здесь $\delta Q_1(\mathbf{q})$ и $\delta Q_2(\mathbf{q})$ определяются аналогично (13), только интегрирование по частоте ведется в пределах $\Delta < \omega < \mu$.

Для $\delta \tilde{Q}(q)$ получается

$$\delta \tilde{Q}(q) = \frac{e^2 v}{4\pi^2 c} \int_0^{p_0} dp \left(\frac{2p^3}{\varepsilon_p q} + \frac{pq}{2\varepsilon_p}\right) \ln \left|\frac{2p+q}{2p-q}\right|.$$
 (23)

Для определения восприимчивости можно разложить входящие в (23) интегралы как функции от параметра q. После вычитания функции отклика при q = 0 это дает

$$\delta \tilde{Q}(q) = \frac{e^2 v q^2}{4\pi^2 c} \left(\frac{1}{6} \int_0^{p_0} \frac{dp}{\varepsilon_p} + \frac{1}{2} \int_0^{p_0} \frac{dp}{\varepsilon_p} \right) = \frac{e^2 v q^2}{6\pi^2 c} \operatorname{Arsh} \frac{p_0 v}{\Delta}.$$

Окончательно вклад в восприимчивость определяется формулой

$$\delta\chi = \frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \operatorname{Arsh} \frac{p_0 v}{\Delta} = \frac{\alpha}{6\pi^2} \frac{v}{c} \operatorname{Arsh} \frac{p_0 v}{\Delta}.$$
 (24)

При $p_0 \rightarrow \infty$ (точнее $p_0 \rightarrow \Lambda$). Arsh $(p_0v/\Delta) \rightarrow \ln(p_0v/\Delta)$ и выражение (24) переходит в (22) с противоположным знаком, как и должно быть в отсутствие носителей. В другом пределе $(p_0 \rightarrow 0)$ восприимчивость переходит в

$$\delta\chi \to \frac{e^2 p_0 v^2}{6\pi^2 c^2 \hbar \Delta} = \frac{e^2 p_0}{6\pi^2 c^2 \hbar m^*} = 2|\chi_L|, \qquad (25)$$

где $m^* = \Delta/v^2$ — эффективная масса, которую можно получить, раскладывая закон дисперсии $\varepsilon_p = \sqrt{\Delta^2 + v^2 p^2}$ при малом импульсе. Восприимчивость (25) совпадает с полной восприимчивостью невзаимодействующего электронного газа, состоящей из суммы восприимчивости Паули и восприимчивости Ландау и равной по абсолютной величине $2|\chi_L|$. Окончательно для магнитной восприимчивости получаем

$$\chi = \frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \left[\ln \frac{\Lambda v}{\Delta} - \operatorname{Arsh} \frac{p_0 v}{\Delta} \right]$$
$$= -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Lambda v}{p_0 v + |\mu|}$$
(26)

(в последнем равенстве знак модуля у μ еще раз подчеркивает тот факт, что формула (26) одинакова для положительных и отрицательных значений химического потенциала).

При $\Delta \ll \mu < \Lambda v$ (26) переходит в формулу, соответствующую (22), с заменой Δ на μ

$$\chi \simeq -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \left[\ln \frac{\Lambda v}{\Delta} - \ln \frac{p_0 v}{\Delta} \right]$$
$$= -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Lambda}{p_0} \simeq -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Lambda v}{\mu}.$$
 (27)

4. Анизотропная восприимчивость при $\mu = 0$

Аналогично предыдущему можно провести вычисления восприимчивости газа в анизотропном случае. Для простоты рассматривается аксиально-симметричная система, в которой тензор матричного элемента скорости v_{ij} , приведенный в главным осям, описывается двумя константами и имеет вид $(v_{\perp}, v_{\perp}, v_{\parallel})$.

Магнитная восприимчивость в этом случае также имеет две компоненты в главных осях (χ_{\parallel} и χ_{\perp}), соответствующие магнитному полю **H**, направленному вдоль оси анизотропии *z* и перпендикулярно ей. Вычисление восприимчивости в этом случае аналогично вычислениям раздела 2 с поправками на анизотропный закон дисперсии и ориентацию векторов **A** и **q** относительно осей анизотропии. Тем не менее заменой переменных интегрирования вычисления сводятся к изотропному случаю. Соответствующий матричный элемент скорости при этом определяется из условия неизменности общего числа состояний с энергиями, меньшими энергии обрезания (имеющей в случае A^4B^6 величину порядка средней щели ионности Δ_{ion} [1]). Таким образом, можно получить для случая **H** || *z*

$$\chi_{\parallel} = -\frac{e^2 v_{\perp}^2}{6\pi^2 c^2 v_{\parallel} \hbar} \ln \frac{\Delta_{\rm ion}}{\Delta}, \qquad (28)$$

а для $\mathbf{H} \perp z$

$$\chi_{\perp} = -\frac{e^2 v_{\parallel}}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Delta_{\rm ion}}{\Delta}.$$
 (29)

При $v_{\parallel} = v_{\perp} = v$ (28),(29) переходят в (22) ($\Lambda v = \Delta_{ion}$). Следует заметить, что область применимости формул (28) и (29) ограничена условием, при котором величины Δ_{ion}/v_{\perp} и $\Delta_{ion}/v_{\parallel}$ (соответствующие импульсам обрезания) не должны превосходить бриллюэновский импульс.

5. Восприимчивость при конечной температуре

Для свободного газа восприимчивость при конечной температуре также может быть легко найдена. Процедура ее определения полностью аналогична описанной выше, но изменяется способ определения матрицы плотности по функции Грина: вместо (6) связь между этими величинами определяется соотношением

$$\hat{\rho}(x,x') = \oint_C \frac{d\omega}{2\pi i} \hat{G}_{\omega}(x,x') n_F(\omega).$$
(30)

Функция $n_F(\omega)$ — обычная фермиевская функция распределения. В (30) интегрирование ведется по контуру, охватывающему все частоты. При этом формулы (13) переходят в

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_1(\mathbf{q}) &= -\frac{e^2 v^2}{c} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \oint_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{1}{\exp\left((\omega-\mu)/T\right) + 1} \\ &\times \frac{2(\omega^2 - \Delta^2)}{\left(\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{p})\right) \left(\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{p} + \mathbf{q})\right)} \end{aligned}$$

и соответственно для $Q_2(\mathbf{q})$. Повторение предыдущих выкладок дает для $\tilde{Q}(q)$ выражение, напоминающее (23)

$$\tilde{Q}(q) = -\frac{e^2 v}{4\pi^2 c} \int_0^\infty dp \left(\frac{2p^3}{\varepsilon_p q} + \frac{pq}{2\varepsilon_p}\right) \\ \times f(\varepsilon_p, \mu, T) \ln \left|\frac{2p+q}{2p-q}\right|.$$
(31)

В (31) введена функция $f(\varepsilon_p, \mu, T) = n_F(-\varepsilon_p) - n_F(\varepsilon_p)$. Из (31) получается результат для магнитной восприимчивости

$$\chi(\mu, T) = -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{dp}{\varepsilon_p} f(\varepsilon_p, \mu, T)$$
$$= -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{dp}{\varepsilon_p} \frac{\operatorname{sh}(\varepsilon_p/T)}{\operatorname{ch}(\varepsilon_p/T) + \operatorname{ch}(\mu/T)}.$$
 (32)

Вид зависимости χ от *T* и μ изображен на рисунке. По горизонтальным осям отложены значения химического потенциала и температуры (отнесенные к полуширине запрещенной зоны), по вертикальной — отношение восприимчивости (с противоположным знаком) к величине $\chi_0 = (e^2 v / 6\pi^2 c^2) \approx 1.2 \cdot 10^{-6}$. Температура меняется от нуля до 0.1 Δ , что приблизительно соответствует 100 К, а положение химического потенциала — от середины запрещенной зоны до дна зоны проводимости $(0 < \mu < \Delta)$. Следует заметить, что при всех возможных значениях Т и µ восприимчивость остается диамагнитной. (Диамагнетизм обусловливается положительностью функции $f(\varepsilon_p, \mu, T)$. Отклик становится парамагнитным при смене знака функции f, что возможно только при отрицательной температуре Т, т.е. при инверсной заселенности).

Нетрудно убедиться, что при $T \rightarrow 0$ и $\mu = 0$ (32) переходит в (22), а при ненулевом μ — в выражение, совпадающее с (26). Из (32) можно получить асимптотику при

$$\mu, \Delta \gg T$$
 и $|\mu - \Delta| \sim T.$ (33)

При таких условиях функция $f(\varepsilon_p, \mu, T)$ может быть представлена в виде $1 - n_F(\varepsilon_p)$. При этом слагаемое в (32) с f = 1 соответствует вкладу в восприимчивость от нижней, полностью заполненной, зоны и в силу первого из условий (33) совпадает с (22). В силу второго из условий (33) носители в верхней зоне можно считать невырожденными, а распределение $n_F(\varepsilon_p)$ — больцмановским. В этом случае восприимчивость имеет вид

$$\delta\chi(\mu,T) = \frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{dp}{\varepsilon_p} \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon_p}{T}\right).$$
(34)

Основной вклад в (34) вносят состояния вблизи дна зоны, где $\varepsilon_p \approx \Delta + (p^2/2\Delta)$, причем зависимость от



Зависимость магнитной восприимчивости от химического потенциала μ и температуры T.

импульса достаточно оставить только в экспоненте. Тогда получается

$$\delta\chi(\mu, T) \simeq \frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2} \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{T}\right) \int_0^\infty \frac{dp}{\Delta} \exp\left(-\frac{p^2}{2\Delta T}\right)$$
$$= \frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2} \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{T}\right) \frac{\sqrt{2\pi\Delta T}}{2\Delta}.$$
 (35)

Для придания ясности этому выражению надо заметить, что концентрация носителей в верхней зоне при тех же предположениях определяется выражением

$$\delta n = \operatorname{Sp}\left(\hat{\rho}(x, x')\right) = 2 \int_{0}^{\infty} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^{3}} \exp\left(\frac{\mu - \varepsilon(\mathbf{p})}{T}\right)$$
$$\approx \exp\left(\frac{\mu - \Delta}{T}\right) \frac{\sqrt{2\pi(T\Delta)^{3}}}{2\pi^{2}}.$$

С учетом этого (35) приобретает вид (см. также комментарий к формуле (25))

$$\delta\chi(\mu,T) \simeq \frac{e^2 v^4 \hbar^2 \delta n}{6c^2 T \Delta^2} = \frac{2}{3} \frac{\delta n}{T} \left(\frac{e\hbar}{2m^* c}\right)^2 \qquad (36)$$

(здесь уже восстановлена правильная степень v). Это выражение совпадает с известной формулой для полной восприимчивости больцмановского электронного газа (см. также (25))

$$\chi = \frac{2}{3} \frac{n}{T} \left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)^2.$$

Наконец, можно получить асимптотику (32) при $\mu, \Delta \ll T < \Lambda v$. Для такой оценки интеграл в (32) разбивается температурой на две части. При больших T доминирует вклад от слагаемого с большой энергией, поэтому в пределе $T \to \infty$ для восприимчивости получается

$$\chi(\mu, T) = -\frac{e^2 v}{6\pi^2 c^2 \hbar} \ln \frac{\Lambda v}{T}.$$
(37)

Это выражение вновь напоминает (22) и (27) с соответствующей заменой.

В заключение следует отметить, что данный способ вычисления наглядно демонстрирует происхождение диамагнитного отклика в подобных системах. Действительно, как нетрудно заметить, из (13) следует, что вклад $Q_1(\mathbf{q})$ одинаков для случая $\mathbf{A} \perp \mathbf{q}$ и $\mathbf{A} \parallel \mathbf{q}$. Поэтому восприимчивость обусловлена $Q_2(\mathbf{q})$, происходящим из недиагональных элементов гамильтониана (1) — элементов, описывающих межзонные переходы. Кроме того, данный диаграммный способ позволяет не фиксировать изначально калибровку, а выбирать ее, исходя из удобства дальнейших вычислений. Указанный метод может оказаться намного более удобным и наглядным при вычислении, например, поправок к восприимчивости, обусловленных примесями и связанными с ними слабой локализацией.

Данная работа выполнена частично при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 96-02-16701*a* и 96-02-19022*a*).

Физика твердого тела, 1998, том 40, № 1

Список литературы

- [1] Б.А. Волков, О.А. Панкратов. ЖЭТФ 75, 4, 1362 (1978).
- [2] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
- [3] А.М. Васильев, Б.А. Волков, Т.М. Волошок, С.В. Кувшинников. Письма в ЖЭТФ **61**, *9*, 768 (1995).
- [4] Л.А. Фальковский, А.В. Бродовой, Г.В. Лошкарев. ЖЭТФ 80, 1, 334 (1981).