

К теории магнитопримесных состояний электронов в проводниках

А.М. Ермолаев, Г.И. Рашба

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина
пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61077, Украина
E-mail: alexander.m.ermolaev@univer.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 15 мая 2003 г., после переработки 6 августа 2003 г.

Рассмотрены проводники с примесными атомами, способными локализовать электроны в магнитном поле. Функциональные методы использованы для изучения магнитопримесных состояний электронов. Эти состояния учтены в формализме Келдыша. Теория проиллюстрирована на примере двумерного электронного газа с примесными атомами в квантующем магнитном поле. Характеристики магнитопримесных состояний вычислены в случае гауссова сепарабельного примесного потенциала.

Розглянуто провідники з домішковими атомами, спроможними локалізувати електрони у магнітному полі. Функціональні методи використано для вивчення магнітодомішкових станів електронів. Ці стани враховано в формалізмі Келдиша. Теорію проілюстровано на прикладі двовимірного електронного газу з домішковими атомами у квантуючому магнітному полі. Характеристики магнітодомішкових станів розраховано у випадку гауссового сепарабельного домішкового потенціалу.

PACS: 71.50.+t, 73.20.Dx

Функциональные методы, развитые в квантовой теории поля, все настойчивее проникают в физику конденсированного состояния [1]. Эти методы используют для расчета кинетических [2,3], термодинамических [4,5] и сверхпроводящих [6] характеристик неупорядоченных трехмерных и двумерных металлов при низких температурах. В работе [2] показано, как метод континуального интегрирования по полям Грассмана может быть использован для расчета матричной функции Грина в технике Келдыша [7,8] и характеристик неупорядоченных проводников в отсутствие магнитного поля. В работе [3] функциональный подход, основанный на формализме Келдыша, использован для расчета низкотемпературной проводимости и других характеристик электронной жидкости в металлах с примесными атомами. Метод интегрирования по грассмановым переменным при изучении равновесных свойств двумерного электронного газа в магнитном поле использован в работах [4,5]. Автор работы [4] ограничился случаем сильного магнитного поля, а в [5] магнитное поле предполагается слабым.

В работах [2–6] влияние примесных атомов на свойства системы аппроксимируется гауссовым дельта-коррелированным случайным потенциалом. Его интенсивность характеризуется частотой столкновений электронов, вычисленной в борновском приближении по электрон-примесному взаимодействию. Это допустимо лишь в случае слабых рассеивателей, не способных локализовать электрон. Учет примесных состояний электронов на изолированных рассеивателях требует выхода за рамки борновского приближения. В работах [2–6] эти состояния не учитываются.

В настоящей работе показано, как в формализме, развитом в [2], учитываются произвольное магнитное поле, примесные и магнитопримесные [9,10] состояния электронов на изолированных атомах примесей. Теория применима как к массивным неупорядоченным проводникам, так и к двумерному электронному газу в гетероструктурах. В качестве иллюстрации вычислены характеристики примесных и магнитопримесных состояний электронов в двумерных проводниках с гауссовым сепарабель-

ным примесным потенциалом, позволяющим получить точное решение задачи.

Задача о влиянии короткодействующего возмущения на энергетический спектр электрона, совершающего двумерное движение в магнитном поле, впервые решена в работе [11]. Авторы этой работы ограничились случаем, когда потенциал возмущения отличен от нуля в пределах квадрата, расположенного в плоскости движения электрона. Общая теория магнитопримесных состояний электронов в двумерных системах с точечными примесными атомами развита в работах [12,13] методом потенциала нулевого радиуса. Гауссов сепарабельный примесный потенциал в работах [11–13] не рассматривался.

Учет произвольного магнитного поля в рамках формализма, развитого в работе [2], сводится к переходу от базиса плоских волн к собственным состояниям электрона в магнитном поле [14]. Поэтому мы ограничимся лишь конечной формулой для матричной функции Грина G электронов, введенной Келдышем [7,8]:

$$iG_{12} = \left(\frac{\delta^L}{i\delta J_1^*} \frac{\delta^R}{i\delta J_2} W[J, J^*] \right)_{\substack{J=0 \\ J^*=0}}. \quad (1)$$

Здесь $W = \ln Z$ — производящий функционал для связанных функций Грина, индексами L и R отмечены левая и правая функциональные производные по фермиевским источникам J^* , J , $1 = (\kappa_1, \alpha_1, t_1)$ (κ — набор орбитальных квантовых чисел Ландау, $\alpha = \pm 1$ — спиновое квантовое число, t — время). Функционал Z имеет вид

$$Z[J, J^*] = \exp \left(-i \sum_{12} U_{12} \frac{\delta^R}{i\delta J_1} \sigma_3 \frac{\delta^L}{i\delta J_2^*} \right) \times \exp \left(-i \sum_{34} J_3^* \overset{0}{G}_{34} J_4 \right), \quad (2)$$

где $U_{12} = \langle \kappa_1 | u | \kappa_2 \rangle \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta(t_1 - t_2)$, u — энергия взаимодействия электрона с примесными атомами, σ_3 — третья матрица Паули, $\overset{0}{G}$ — матричная функция Грина электронов в магнитном поле,

$$\sum_1 = \sum_{\kappa_1 \alpha_1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1.$$

Мы не учитываем кулоновское взаимодействие электронов. Квантовая постоянная принята равной единице. Таким образом, процедура расчета функции Грина свелась к вычислению функциональных производных в формулах (1) и (2).

Формула (2) позволяет представить производящий функционал в виде ряда по степеням возмущения. Функция Грина (1) также представляется в виде ряда, совпадающего с полученным на основе диаграммной техники, использующей теорему Вика [8]. В частности, поправки первого порядка к компонентам матричной функции Грина (1) равны

$$G_{12}^{1^{++}} = \sum_{34} U_{34} \begin{pmatrix} 0^{+-} & 0^{-+} & 0^{++} & 0^{+-} \\ G_{13} & G_{42} & -G_{13} & G_{42} \end{pmatrix},$$

$$G_{12}^{1^{+-}} = \sum_{34} U_{34} \begin{pmatrix} 0^{+-} & 0^{--} & 0^{++} & 0^{+-} \\ G_{13} & G_{42} & -G_{13} & G_{42} \end{pmatrix},$$

$$G_{12}^{1^{-+}} = \sum_{34} U_{34} \begin{pmatrix} 0^{--} & 0^{-+} & 0^{-+} & 0^{++} \\ G_{13} & G_{42} & -G_{13} & G_{42} \end{pmatrix},$$

$$G_{12}^{1^{--}} = \sum_{34} U_{34} \begin{pmatrix} 0^{--} & 0^{--} & 0^{-+} & 0^{+-} \\ G_{13} & G_{42} & -G_{13} & G_{42} \end{pmatrix}.$$

Здесь \pm — индексы в двумерном пространстве Келдыша. Диаграммы для этих поправок приведены в [8]. Они отличаются от обычных диаграмм крестовой техники [15] дополнительными индексами \pm на концах линий.

Здесь мы ограничимся выборочным суммированием диаграмм с одним крестом для запаздывающей функции Грина $G = G^{++} - G^{+-}$ электронов в двумерном проводнике, усредненной по конфигурациям примесей. Такая аппроксимация позволяет точно учесть амплитуду рассеяния электронов изолированными примесными атомами при малой концентрации последних. Рассеивающий потенциал выберем в форме

$$\hat{V} = \sum_j |\eta_j\rangle u_0 \langle \eta_j|, \quad (3)$$

где $|\eta_j\rangle \langle \eta_j|$ — оператор проектирования на вектор $|\eta_j\rangle$, u_0 — константа, индекс j нумерует примесные атомы. Функцию $\eta(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \eta \rangle$ будем считать равной

$$\eta(\mathbf{r}) = (\sqrt{\pi}a)^{-1} \exp \left(-\frac{r^2}{2a^2} \right),$$

где a — постоянная. Такой потенциал при изучении магнитопримесных состояний в массивных проводниках использован в работе [16]. Переход в формуле (3) к сумме дельта-функций $v_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ осуществляется заменой

$$4\pi \lim_{\substack{a \rightarrow 0 \\ u_0 \rightarrow \infty}} (a^2 u_0) = v_0.$$

Преимущество выбранного здесь потенциала состоит в том, что он содержит два независимых параметра u_0 и a , в то время как точечный потенциал характеризуется лишь одним параметром v_0 .

В случае потенциала (3) сумма диаграмм с одним крестом для средней функции Грина в $(\kappa, \alpha, \varepsilon)$ -представлении (ε — энергетическая переменная) равна $G = G_0 + G_0 T G_0$, где величина

$$T_\alpha(\varepsilon) = u_0 n_i \left(1 - u_0 \sum_{\kappa} \frac{|\langle \kappa | \eta \rangle|^2}{\varepsilon - \varepsilon_{\kappa\alpha}} \right)^{-1} \quad (4)$$

пропорциональна амплитуде рассеяния электронов, $\varepsilon_{\kappa\alpha}$ — уровни Ландау, n_i — плотность примесных атомов. Исползованный в данной работе примесный потенциал позволяет избавиться от расходимости суммы в формуле (4), присущей дельта-образному потенциалу, проще, чем это достигается методом потенциала нулевого радиуса. Входящая в (4) функция $\langle \kappa | \eta \rangle$ равна

$$\langle nm | \eta \rangle = \sqrt{2} \delta_{m0} \frac{l}{a} \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{1}{2} \right)^{-1} \left[\left(\frac{l^2}{a^2} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{1}{2} \right)^{-1} \right]^n. \quad (5)$$

Здесь l — магнитная длина, n — осцилляторное квантовое число, m — квантовое число орбитального углового момента электрона в магнитном поле \mathbf{H} . Вектор \mathbf{H} перпендикулярен плоскости $z = 0$, занятой электронами. Наличие δ_{m0} в формуле (5) означает, что рассматриваемый потенциал, как и точечный потенциал [12], рассеивает лишь состояния с $m = 0$. Из формул (4) и (5) следует, что магнитопримесные уровни энергии электронов являются корнями уравнения И. Лифшица [17] $u_0^{-1} = F_\alpha(\varepsilon)$. В рассматриваемом случае это уравнение имеет вид

$$\frac{\omega_c}{u_0} = -2 \left(\frac{l}{a} \right)^2 \left[\left(\frac{l}{a} \right)^2 + \frac{1}{2} \right]^{-2} \times \Phi \left(\left[\frac{\left(\frac{l}{a} \right)^2 - \frac{1}{2}}{\left(\frac{l}{a} \right)^2 + \frac{1}{2}} \right]^2, 1, \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{\omega_c} + \alpha \frac{\mu H}{\omega_c} \right), \quad (6)$$

где ω_c — циклотронная частота электрона, μ — его спиновый магнитный момент,

$$\Phi(x, 1, v) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{v+n}$$

— специальная функция [18]. Корни этого уравнения определяются двумя независимыми параметрами ω_c/u_0 и l/a . Точное уравнение (6) для гауссова сепарабельного примесного потенциала получено впервые.

Из уравнения (6) следует, что в спектре энергии электронов существует система локальных уровней, отщепленных примесными атомами от уровней Ландау вверх или вниз в зависимости от знака u_0 . При $u_0 > 0$ локальный уровень энергии электрона, спиновый магнитный момент которого ориентирован вдоль магнитного поля, расположен в области $\varepsilon < 0$, если $\mu H > \omega_c/2$ и $u_0 < F_{-1}^{-1}(0)$. Поскольку в работах [11–13] спиновое расщепление уровней Ландау не учитывается, такая возможность там отсутствует. Когда a и l различаются сильно, расстояние Δ между уровнем Ландау и отщепленным от него магнитопримесным уровнем мало по сравнению с ω_c :

$$\Delta = \begin{cases} \omega_c \left[\ln \left(2 \frac{a^2}{l^2} \right) + (2m_* a^2 |u_0|)^{-1} \right]^{-1}, & a \ll l, \\ \omega_c \left[\ln \left(8 \frac{l^2}{a^2} \right) + \frac{1}{8} \left(\frac{a}{l} \right)^2 \frac{\omega_c}{|u_0|} \right]^{-1}, & a \gg l, \end{cases}$$

где m_* — эффективная масса электрона. При $a \ll l$ предельное значение величины отщепления с точностью до численных множителей, связанных с другой моделью примесного потенциала, совпадает с выражениями (25) и (28) в работе [11]. В случае $a \ll l$ найденные здесь положения локальных уровней являются полюсами амплитуды рассеяния (3.6) в статье [12]. Уравнение И. Лифшица в этой статье содержит лишь один параметр — длину рассеяния электронов в отсутствие магнитного поля. Случай $a \gg l$ в работах [11–13] не рассматривался. В квантовом пределе из уравнения (6) получаем выражение

$$\Delta = 2u_0 \left(\frac{l}{a} \right)^2 \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{l}{a} \right)^2 \right]^{-2},$$

справедливое при любом значении a/l . Если $|u_0| \rightarrow \infty$, энергия электрона в связанном состоянии равна $-|u_0|$. Ширины магнитопримесных уровней в рассматриваемом приближении равны нулю.

Амплитуда рассеяния (4) имеет обычный вид [17]

$$T_\alpha(\varepsilon) = u_0 n_i \{ 1 - u_0 [F_\alpha(\varepsilon) - i\pi g_\alpha(\varepsilon)] \}^{-1},$$

где

$$g_\alpha = \frac{8}{\omega_c} \left(\frac{l}{a} \right)^2 \left[2 \left(\frac{l}{a} \right)^2 + 1 \right]^{-2} \times$$

$$\times \left[\left(2 \frac{l^2}{a^2} + 1 \right) \left(2 \frac{l^2}{a^2} - 1 \right)^{-1} \right]^{2\beta_\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(n + \beta_\alpha),$$

$$\beta_\alpha = \frac{1}{2} + \alpha \frac{\mu H}{\omega_c} - \frac{\varepsilon}{\omega_c}.$$

В пределе $a \rightarrow 0$, $u_0 \rightarrow \infty$ функция $u_0 g_\alpha(\varepsilon)$ переходит в $v_0 v_\alpha(\varepsilon)$, где $v_\alpha(\varepsilon)$ — плотность электронных состояний в магнитном поле. Вычет амплитуды рассеяния электронов отдельным примесным центром в полюсе равен

$$R = \begin{cases} \frac{1}{2} \omega_c^2 \left(\frac{l}{a} \right)^2 \zeta^{-1} \left(2, -\frac{\Delta}{\omega_c} \right), & a \ll l, \\ \frac{1}{8} \omega_c^2 \left(\frac{a}{l} \right)^2 \zeta^{-1} \left(2, -\frac{\Delta}{\omega_c} \right), & a \gg l, \end{cases}$$

где ζ — обобщенная дзета-функция [18]. Волновая функция электрона в связанном состоянии с энергией ε_l имеет вид

$$\Psi_{m\alpha}(r, \varphi) \sim \exp\left(-\frac{r^2}{4l^2} + im\varphi\right) \Psi\left(\frac{1}{2} - \frac{\varepsilon_l}{\omega_c} + \alpha \frac{\mu H}{\omega_c}, 1; \frac{r^2}{2l^2}\right),$$

где r, φ — полярные координаты, Ψ — вырожденная гипергеометрическая функция [18].

В отсутствие магнитного поля уравнение И. Лифшица для примесных состояний электрона в поле (3) имеет вид

$$1 - u_0 [F(\varepsilon) - i\pi g(\varepsilon)] = 0, \quad (7)$$

где

$$F(\varepsilon) = \varepsilon_0^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right) \begin{cases} E_i\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right), & \varepsilon > 0, \\ -E_1\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right), & \varepsilon < 0, \end{cases}$$

$$g(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon) \varepsilon_0^{-1} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right).$$

Здесь $\varepsilon_0 = (2m_* a^2)^{-1}$, E_i и E_1 — интегральные показательные функции [18], Θ — функция Хевисайда.

Из уравнения (7) следует, что в поле притяжения ($u_0 < 0$) при любом значении $|u_0|$ существует локальный уровень ε_l , расположенный ниже границы сплошного спектра. Кроме того, в области $\varepsilon > 0$ существует антирезонансный уровень ε_a . Наличие такого уровня означает, что в поле притяжения происходит «перекачка» состояний из окрестности

уровня ε_a на локальный уровень. Если $|u_0| \ll \varepsilon_0$, положения этих уровней даются формулой [14]

$$\varepsilon_{l,a} = \pm \varepsilon_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0}{|u_0|}\right).$$

Волновая функция электрона в связанном состоянии равна

$$\psi(r) \sim K_0(\sqrt{2m_* |\varepsilon_l|} r),$$

где K_0 — функция Макдональда [18].

В поле отталкивания ($u_0 > 0$) существует критическое значение $u_{0k} \sim \varepsilon_0$ такое, что при $u_0 < u_{0k}$ примесные состояния отсутствуют. Если же $u_0 > u_{0k}$, существуют резонансный ε_r и антирезонансный ε_a уровни, причем $\varepsilon_r > \varepsilon_a$. Если $u_0 < u_{0k}$, электроны испытывают лишь потенциальное рассеяние примесными центрами. Сдвиг фазы волновой функции в процессе рассеяния равен

$$\delta = -\arctg \frac{\pi g}{u_0^{-1} - F}.$$

Он резко изменяется на π при переходе через энергию резонанса ε_r . Сечение двумерного рассеяния

$$\sigma = \frac{4}{k} \frac{(\pi u_0 g)^2}{(1 - u_0 F)^2 + (\pi u_0 g)^2}$$

($k = \sqrt{2m_* \varepsilon}$) имеет брейт-вигнеровский максимум в точке ε_r . Ширина максимума равна $\pi g(\varepsilon_r)/|F'|$. Штрихом отмечена производная в точке ε_r .

Работа частично поддержана программой INTAS (грант INTAS-01-0791) и программой European Network of Excellence in «Fundamentals of Nanoelectronics».

1. А.М. Цвеллик, *Квантовая теория поля в физике конденсированного состояния*, Физ.-мат. лит., Москва (2002).
2. V.S. Babichenko and A.N. Kozlov, *Solid State Commun.* **59**, 39 (1986).
3. A. Kamenev and A. Andreev, *Phys. Rev.* **B60**, 2218 (1999).
4. E. Brezin, in: *Applications of Field Theory to Statistical Mechanics*, Springer-Verlag, Berlin (1985).
5. I.S. Burmistrov, *ЖЭТФ* **122**, 150 (2002).
6. M.V. Feigelman, A.I. Larkin, and M.A. Skvortsov, *Phys. Rev.* **B61**, 12361 (2000).
7. Л.В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1515 (1964).
8. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
9. А.М. Ермолаев, М.И. Каганов, *Письма в ЖЭТФ* **6**, 984 (1967).
10. Э.А. Канер, А.М. Ермолаев, *ЖЭТФ* **92**, 2245 (1987).
11. А.М. Косевич, Л.В. Танатаров, *ФТТ* **6**, 3423 (1964).

12. Y. Avishai, M.Ya. Azbel, and S.A. Gredeskul, *Phys. Rev.* **B48**, 17280 (1993).
13. S.A. Gredeskul, M. Zusman, Y. Avishai, and M.Ya. Azbel, *Phys. Rep.* **288**, 223 (1997).
14. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989).
15. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
16. М.И. Каганов, С. Кляма, *ФТТ* **20**, 2360 (1978).
17. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Наука, Москва (1982).
18. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, Москва, т. 1 (1965), т. 2 (1966).

To the theory of magnetoimpurity states of electrons in conductors

A.M. Ermolaev and G.I. Rashba

The impurity conductors in a quantizing magnetic field are considered. The impurities are capable of localizing electrons in such a field. The functional methods are used to study the magnetoimpurity states of electrons. The magnetoimpurity states of electrons are taken into account in the Keldysh formalism. The theory is illustrated by example of a two-dimensional electron gas with impurity atoms in the presence of quantizing magnetic field. The characteristics of the magnetoimpurity states of electrons are calculated in terms of the model of Gaussian separable impurity potential.