

К теоретическому описанию низкотемпературных эффектов в металлах и легированных полупроводниках на основе квантовой теории электронной жидкости

В.И. Окулов

Институт физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620041, Россия
E-mail: okulov@imp.uran.ru

Е.А. Памятных

Уральский государственный университет им. А.М. Горького, пр. Ленина, 51, г. Екатеринбург, 620083, Россия

В.П. Силин

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский пр., 53, г. Москва, 119991, Россия

Статья поступила в редакцию 29 мая 2009 г.

Изложена формулировка исходных положений квантовой теории электронной жидкости как основы теоретического описания вклада слабозбужденных одночастичных состояний электронной системы в низкотемпературные свойства твердых тел. Данная квантовомеханическая формулировка, не конкретизирующая изначально реальный одночастичный базис, позволяет рассматривать роль межэлектронного взаимодействия в условиях орбитального квантования и существенной роли других квантовых явлений. В статье содержится краткое описание вывода основных термодинамических соотношений и приведены формулы для теплоемкости, модулей упругости и магнитной восприимчивости, полученные в рамках ферми-жидкостного подхода без обычно принимаемых модельных предположений. Рассмотрено применение изложенной теории к описанию роли межэлектронного взаимодействия в термодинамических явлениях в системах с гибридизованными электронными состояниями, образованными примесными донорными резонансными уровнями в полосе проводимости кристалла. Приведена также формулировка уравнения для спонтанного локализованного спинового магнитного момента в гибридизованных состояниях.

Викладено формулювання вихідних положень квантової теорії електронної рідини як основи теоретичного опису внеску слабозбуджених одночасткових станів електронної системи в низькотемпературні властивості твердих тіл. Це квантовомеханічне формулювання, що не конкретизує первісний реальний одночастковий базис, дозволяє розглядати роль міжелектронної взаємодії в умовах орбітального квантування й істотної ролі інших квантових явищ. Стаття містить короткий опис виводу основних термодинамічних співвідношень і формули для теплоємності, модулів пружності й магнітної сприйнятливості, які отримано в рамках фермі-рідинного підходу без звичайно прийнятих модельних припущень. Обговорюється питання що до застосування викладеної теорії до опису ролі міжелектронної взаємодії в термодинамічних явищах у системах з гібридизованими електронними станами, утвореними домішковими донорними резонансними рівнями в смузї провідності кристалла. Наведено також формулювання рівняння для спонтанного локалізованого спінового магнітного моменту в гібридизованих станах.

PACS: 72.20.Dr Общая теория, механизмы рассеяния;
72.20.Fr Транспорт и подвижность в слабых полях, пьезосопротивление;
72.80.Ey Полупроводники III–V и II–VI групп.

Ключевые слова: электронная теория, электронная жидкость, электронная теплоемкость, гибридизованные состояния.

Введение

Первые два раздела настоящей статьи посвящены известным теоретическим аспектам описания низко-

температурных физических свойств электронной системы твердых тел с учетом межэлектронного взаимодействия. Речь идет о строгой квантовомеханической

кой формулировке основных положений и результатов применения разработанного подхода электронной теории, который состоит в описании слабозбужденных состояний электронной системы как одночастичных состояний, отражающих в соответствующем объеме влияние межэлектронного взаимодействия. Такой подход при его возникновении был обозначен как «теория электронной жидкости», или «ферми-жидкостный подход». Мы добавляем к этому указание на квантовый характер рассмотрения, подчеркивая применимость теории при любом одночастичном базисе, в частности при квантовании орбитального движения. Точность в терминологии, касающейся ферми-жидкостного подхода, в настоящее время необходима. Дело в том, что о существовании этой терминологии в теоретических работах уже давно, а в последнее время все шире, распространяются довольно различные представления, часто не определяемые четко. Особенно характерны утверждения, декларирующие неоправданно узкую область применимости ферми-жидкостного подхода. Например, утверждается, что этот подход приводит только к вполне конкретным температурным зависимостям проводимости, не согласующимся с экспериментальными данными для некоторых («не ферми-жидкостных») объектов. Однако при правильном определении вполне очевидно, что нет никаких оснований для того, чтобы связывать применимость ферми-жидкостного подхода с осуществлением какой-либо конкретной температурной зависимости проводимости или другой физической величины. Непонимание этой и других деталей данного подхода отчасти связано с недостаточно полным изложением его современного уровня в широко распространенной литературе и даже в известных фундаментальных книгах [1–3]. В связи с этим мы посчитали актуальным в какой-то мере устранить этот недостаток, изложив основные положения и термодинамические результаты квантового варианта теории электронной жидкости как основы для изучения низкотемпературных электронных явлений. Думаем, что это будет достаточно уместным в данном специальном выпуске журнала, посвященном юбилею академика Б.И. Веркина — организатора и руководителя института, в стенах которого им и его коллегами внесен фундаментальный вклад в низкотемпературные исследования и электронную теорию.

Первый раздел статьи посвящен термодинамике электронной системы в пределе ее однородности, то есть без учета роли квантовых неоднородностей, о которой речь идет во втором разделе. После изложения основных положений теории приводится вывод ферми-жидкостных формул для теплоемкости и объемного модуля упругости, которые записаны без обычно принимаемых упрощающих аппроксимаций. На осно-

ве полученных формул кратко обсуждается описание возможных низкотемпературных аномалий данных величин. Во втором разделе рассмотрена реакция на неоднородные возмущения с помощью исходного квантового кинетического уравнения для электронной жидкости. Дано обобщение термодинамических формул для учета квантовых неоднородностей электронной плотности и приведены полные выражения для магнитной восприимчивости. Третий раздел посвящен новым результатам, относящимся к предсказанию и описанию эффектов ферми-жидкостного взаимодействия в низкотемпературных свойствах системы электронов в гибридизированных состояниях, образованных донорными примесями в полосе проводимости полупроводника. На основе подхода, изложенного в предыдущих разделах, получены формулы, описывающие данные эффекты, и уравнение для спонтанной спиновой поляризации гибридизированных состояний.

Одночастичные электронные состояния и межэлектронное взаимодействие в термодинамике электронной системы кристаллов

Описание свойств системы коллективизированных электронов кристалла на основе представлений об одночастичном характере электронных состояний уже давно стало привычным и оправданным для широкого круга систем. В рамках этих представлений мы рассмотрим роль межэлектронного взаимодействия в физических явлениях. Начало последовательному решению связанных с этим проблем было положено в работах В.А. Фока, результаты которых содержатся в статьях [4] и книге [5]. В этих работах фактически был сформулирован общий метод определения одночастичных состояний и строго обосновано понятие квантовомеханического самосогласованного поля, определяющего энергию электрона в многоэлектронной системе. В современных публикациях часто фигурирует «приближение Хартри–Фока», которое отвечает решению уравнений Фока в предположении о слабости межэлектронного взаимодействия, имеющей место при нереально высокой плотности. На основании результатов этого приближения иногда возникает мнение, что сами уравнения Фока справедливы лишь в том же предположении. Однако по сути своей уравнения Фока построены так, чтобы дать одночастичное описание при реальной величине энергии взаимодействия. Можно лишь поставить вопрос о применимости самого одночастичного описания, который и был в итоге решен в рамках ферми-жидкостного подхода. К середине двадцатого века было выполнено большое число исследований свойств электронных систем в рамках различных приближений относительно самосогласованного поля, предпо-

лагавшегося в каком-либо отношении слабым. Особенно детально было разработано так называемое «приближение хаотических фаз» [6,7], в котором отражены существенные черты влияния взаимодействия на свойства электронной системы. Результаты этих исследований предшествовали созданной Л.Д. Ландау [8,9] теории физических свойств квантовых жидкостей как систем, состоящих из взаимодействующих нейтральных частиц, основу которой составляет последовательное описание слабозбужденных состояний такой системы. Дальнейшим шагом стало распространение основных положений теории ферми-жидкости на электронные системы, в ходе которого потребовалось учесть электромагнитную часть самосогласованного поля, что и было сделано в работах [10,11]. В кинетике слабозбужденных состояний важную роль в обосновании данной теории играют также принципы вывода кинетических уравнений, разработанные применительно к квантовым системам Н.Н. Боголюбовым и К.П. Гуровым [12]. В целом положения теории Ландау определили ферми-жидкостный подход, о котором шла речь выше. Изложение различных аспектов его квантовомеханического обоснования и общих результатов применения имеется в статьях и книгах [13–20].

Первое и главное положение ферми-жидкостного подхода применительно к электронной системе кристалла состоит в следующем. Пусть E_0 — энергия основного состояния системы (энергия связи при соответствующем начале отсчета) и $E = E_0 + \delta E$ — энергия слабозбужденного состояния ($\delta E \ll |E_0|$). Тогда если построить одночастичное описание состояния той же системы с энергией E , то совокупность возбужденных одночастичных состояний будет правильно описывать возбужденное состояние исходной системы. Другими словами, слабозбужденное состояние многоэлектронной системы с энергией E отличается от основного состояния наличием совокупности ее одночастичных состояний при той же энергии E . Это утверждение естественно для систем, в которых нет значительных сил притяжения между частицами, поскольку в таком случае при малом повышении энергии вероятней возбуждение малого числа отдельных частиц, чем предварительно образованного комплекса частиц, обладающего большей кинетической энергией. Полезно напомнить, что факт существования множества такого рода систем (называемых нормальными в отличие от сверхпроводящих) подтвержден огромным числом экспериментальных данных, согласующихся со следствиями излагаемой теории.

Другое основное положение подхода, также сформулированное в виде определенного утверждения, касается статистического описания одноэлектронных состояний многоэлектронной системы. При таком

описании распределение занятых состояний является статистическим, и в целом система характеризуется средней энергией и статистическим весом или энтропией. Упомянутое основополагающее утверждение состоит в том, что учет взаимодействия не влияет на определение статистического веса системы в одночастичных состояниях. Полезно изложить здесь соответствующий способ получения выражений для энтропии и одночастичной функции распределения, хотя он давно и хорошо известен. Введем одночастичные квантовые числа ν , включающие спиновый индекс σ и орбитальные числа α , которые определяются симметрией полей, действующих на электроны (кристаллического поля ионных остовов, магнитного поля и других). Для выполнения статистического описания необходимо произвести крупноструктурное сглаживание, объединив состояния с близкими значениями квантовых чисел, неразличимыми при макроскопическом описании, в группы, содержащие большое число состояний G_ν . Число способов заполнения некоторого также большого числа N_ν из этих состояний определяет статистический вес данного заполнения:

$$\Gamma_\nu = \frac{G_\nu!}{N_\nu!(G_\nu - N_\nu)!}, \quad (1)$$

а логарифм произведения величин Γ_ν представляет собой безразмерную энтропию:

$$S = - \sum_\nu [f_\nu \ln f_\nu + (1 - f_\nu) \ln(1 - f_\nu)], \quad (2)$$

где $f_\nu = N_\nu / G_\nu$ — функция распределения заполненных состояний. Термодинамическое равновесие отвечает максимуму энтропии при заданных значениях энергии и числа электронов, т.е. равенству нулю линейной комбинации ее вариации по функции распределения

$$\delta S = - \sum_\nu \ln \left(\frac{f_\nu}{1 - f_\nu} \right) \delta f_\nu \quad (3)$$

с обращающимися в нуль вариациями энергии

$$\delta E = \sum_\nu \left(\frac{\delta E}{\delta f_\nu} \right) \delta f_\nu \equiv \sum_\nu \varepsilon_\nu \delta f_\nu \quad (4)$$

и числа занятых одночастичных состояний:

$$\sum_\nu \delta N_\nu = \sum_\nu \delta f_\nu. \quad (5)$$

Вычитая из правой части равенства (3) правые части равенств (4) и (5) с множителями, которые полагаем равными соответственно $1/T$ и $(-\zeta/T)$, и решая затем полученное уравнение для f_ν , находим функцию распределения в следующем виде:

$$f_v = \{1 + \exp[(\epsilon_v - \zeta) / T]\}^{-1}. \quad (6)$$

Равенство (4) служит определением одночастичной энергии ϵ_v как вариационной производной равновесной энергии по функции распределения. Она является функционалом функции f_v , определенной равенством (6). Именно эта функциональная зависимость отражает основной эффект взаимодействия между электронами в одночастичных состояниях. Равновесную энтропию, согласно определениям (2) и (6), можно записать следующим образом:

$$S = - \sum_v [-f_v \eta_v + \ln(1 - f_v)], \quad (7)$$

где $\eta_v = (\epsilon_v - \zeta) / T$. Ее вариация δS с учетом равенства

$$\delta f_v = -f_v(1 - f_v)\delta\eta_v \quad (8)$$

при условии равенства нулю вариации (5) и в предположении об отсутствии внешних силовых воздействий, удовлетворяет термодинамическому соотношению

$$T\delta S = \sum_v (\epsilon_v - \zeta)\delta f_v = \sum_v \epsilon_v \delta f_v = \delta E, \quad (9)$$

которым устанавливается смысл как температуры величины T , введенной в качестве параметра при определении функции распределения. С другой стороны, если вместо равенства нулю вариации (5) принять

$$\sum_v \delta f_v = 1 \quad (10)$$

и рассмотреть изменение энергии δE при неизменной энтропии ($\delta S = 0$), то получим $\delta E = \zeta$. Этим определяется смысл величины ζ как химического потенциала. Согласно изложенному выше, химический потенциал электронов следует находить из условия равенства полного числа заполненных одночастичных состояний заданному числу N , которое определяется числом степеней свободы всей системы электронов. Поскольку при реализации одночастичного описания состояний системы нет причин для изменения полного числа степеней свободы, число N совпадает с полным числом электронов. Часто упоминаемая в связи с этим теорема о равенстве числа квазичастиц числу частиц относится к возбуждениям электронов в системе, находящейся в основном состоянии, и отражает специфику квантовополевой методики; этот вопрос рассмотрен в книге [20]. Таким образом, уравнение для определения химического потенциала записывается в виде

$$\sum_v f_v = N. \quad (11)$$

Уравнения (6), (7) и (11) определяют зависимость энергии от энтропии: $E\{f\} = E(S)$, которая составляет

основу статистического описания системы одночастичных состояний.

Для рассмотрения термодинамических свойств системы принимаем в качестве переменных температуру и величину, характеризующую локальную деформацию. Изменение электронной энергии при деформации происходит из-за смещения ионной плотности заряда, поле которой удерживает электроны в определенном объеме. Если \mathbf{u} — вектор смещения, то однородная всесторонняя деформация ионной плотности заряда характеризуется величиной $\delta v = \text{div } \mathbf{u}$. Термодинамические уравнения получаются при разложении энергии и энтропии по δv и вариации температуры δT . При разложении энергии по δv представляем вариацию δE в виде суммы одночастичных вкладов $\delta(G_v f_v \epsilon_v)$ каждой группы состояний с данным значением v . Число состояний G_v пропорционально объему, поэтому $\delta G_v = G_v \delta v$. В соответствии с этим линейная часть разложения энергии имеет вид

$$\begin{aligned} \delta E = \sum_v \delta(G_v f_v \epsilon_v) &= \sum_v G_v [f_v \epsilon_v \delta v + \epsilon_v \delta f_v + (\epsilon_v)_f f_v] = \\ &= \sum_v \{ \epsilon_v (f_v \delta v + \delta f_v) + (\delta \epsilon_v)_f f_v \}. \end{aligned} \quad (12)$$

Под знаком суммы в этом выражении записано полное изменение отдельного одночастичного вклада в энергию. Первые два слагаемых отражают соответственно изменение числа состояний G_v при вариации объема и числа электронов N_v при вариации переменных, от которых зависит функция распределения. Третье слагаемое связано с проявлением изменения поля ионов в энергии отдельных электронов, и соответствующая добавка к энергии записывается следующим образом:

$$(\delta \epsilon_v)_f = \Lambda_v \delta v. \quad (13)$$

Здесь Λ_v — деформационный потенциал. Заметим, что два слагаемых (первое и третье) в формуле (12), отражающих влияние деформации системы на энергию электронов, по существу, отвечают разделению плотности заряда ионов на однородную часть, компенсирующую полный заряд электронов, и периодическую часть, создающую кристаллическое поле, действующее на электроны. Если ионы моделировать только однородным положительным фоном (модель «желе», плазменная модель металла), то $\Lambda_v = 0$, и остается только первое слагаемое, описывающее роль деформации этого фона. Вклад деформации содержится также и в δf_v через вариации энергии электрона и химического потенциала.

Вариация энтропии и уравнение для вариации химического потенциала находятся из формул (7) и (11) с учетом равенства (8):

$$\delta S = \sum_v \{ [f_v \eta_v - \ln(1 - f_v)] \delta v + \eta_v \delta f_v \}, \quad (14)$$

$$\delta N = \sum_v (f_v \delta v + \delta f_v) = 0. \quad (15)$$

Из равенств (12), (14) и (15) следует основное термодинамическое уравнение:

$$\delta E = T \delta S + \sum_v [\Lambda_v f_v + T \ln(1 - f_v)] \delta v. \quad (16)$$

Второе слагаемое $(\delta E)_S$ в его правой части отражает рассмотренный ниже электронный вклад в давление и в уравнение состояния. Оно имеет вид такой вариации по объему, в которой варьируется только число состояний G_v , пропорциональное объему и, следовательно, последующим вариациям по v не подлежащее. Поэтому при варьировании величины $(\delta E)_S$ следует учитывать только переменные, входящие в функцию распределения. С учетом этого получаются следующие формулы для вариаций слагаемых в уравнении (16) при постоянной температуре и постоянной энтропии:

$$[\delta^2(E - TS)]_T = \sum_v [\Lambda_v (\delta f_v)_T + f_v T (\delta \eta_v)_T] \delta v, \quad (17)$$

$$(\delta^2 E)_S = \sum_v [\Lambda_v \delta f_v + f_v T \delta \eta_v + \delta T \ln(1 - f_v)] \delta v. \quad (18)$$

Формулой (17) определяется электронный вклад в изотермический модуль всестороннего сжатия. Из формулы (18) находится электронный адиабатический модуль упругости, если выразить δT из уравнения, получаемого при обращении в нуль величины δS в равенстве (14). С другой стороны, если с помощью уравнения состояния записать условие равенства нулю вариации давления, то формула (18) дает возможность найти производную $\delta v / \delta T$, подстановка которой в равенство (14) приводит к выражению для теплоемкости при постоянном давлении.

Чтобы записать в явном виде приведенные выражения (12), (14), (15), (17) и (18), необходимо получить величину δf_v (т.е. $\delta \eta_v$) в виде функции от δv и δT . Исходная формула преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \delta f_v &= -f_v(1 - f_v) \delta \eta_v = f'_v [\delta \epsilon_v - \delta \zeta - \eta_v \delta T] = \\ &= f'_v \left[\left(\frac{\delta \epsilon_v}{\delta v} \right) \delta v - \left(1 - \frac{d \epsilon_v}{d \zeta} \right) \delta \zeta - \left(\eta_v - \frac{d \epsilon_v}{dT} \right) \delta T \right] \equiv \\ &\equiv f'_v [\Lambda_v \delta v - I_v \delta \zeta - D_v \delta T] = \\ &= f'_v \left[\left(\Lambda_v^e - I_v \frac{\delta \zeta}{\delta v} \right) \delta v - \left(D_v + I_v \frac{d \zeta}{dT} \right) \delta T \right], \quad (19) \end{aligned}$$

где $f'_v = -f_v(1 - f_v)/T$ — производная функции f_v по энергии ϵ_v . Производные энергии ϵ_v по термодинамическим переменным находятся из исходного уравнения (6) с учетом того, что ϵ_v является функционалом f_v . Вводим функцию ферми-жидкостного взаимодействия $F(v, v')$ как функциональную производную

$$\frac{\delta \epsilon_v}{\delta f_{v'}} = \frac{\delta^2 E}{\delta f_v \delta f_{v'}} \equiv F(v, v') \quad (20)$$

и записываем общее уравнение для вариации энергии одночастичного состояния:

$$\delta \epsilon_v = (\delta \epsilon_v)_f + \sum_{v'} F(v, v') \delta f_{v'}. \quad (21)$$

Два слагаемых в правой части уравнения (21) описывают соответственно изменение энергии отдельного электрона без учета возмущения состояний других электронов и вклад ферми-жидкостного взаимодействия, отражающего изменение состояния всей системы при воздействии на отдельное состояние. В рассматриваемом нами случае величина $(\delta \epsilon_v)_f$ определена формулой (13), а $\delta f_{v'}$ — формулой (19). Подставляя в качестве $\delta f_{v'}$ выражение, записанное после третьего знака равенства в (19), получаем уравнения для производных энергии, а затем уравнения для эффективных величин:

$$\Lambda_v^e = \Lambda_v + \sum_{v'} F(v, v') f'_{v'} \Lambda_{v'}^e, \quad (22)$$

$$I_v = 1 + \sum_{v'} F(v, v') f'_{v'} I_{v'}, \quad (23)$$

$$D_v = \eta_v + \sum_{v'} F(v, v') f'_{v'} D_{v'}. \quad (24)$$

Теперь следует подставить величину δf_v в полученном виде (19) в приведенные выше формулы для вариаций энергии и энтропии. В конечных выражениях учтем, что при вычислениях суммы по квантовым числам v используются периодические граничные условия и в промежуточных формулах появляется нормировочный объем V . Тогда можно заменить δv на dV/V и ввести обычно применяемые производные по V . Из уравнения (16) определим электронную часть давления

$$p_e = -\frac{1}{V} \sum_v [\Lambda_v f_v + T \ln(1 - f_v)], \quad (25)$$

а из равенств (15), (17) — изотермический модуль упругости электронной системы:

$$\lambda_T = V \left(\frac{d^2 E}{dV^2} \right) = \frac{1}{V} \sum_v \left[(\Lambda_v f'_v + f_v) \left(\Lambda_v^e - I_v V \frac{d \zeta}{dV} \right) \right], \quad (26)$$

$$V \frac{d\zeta}{dV} \sum_{\nu} f'_{\nu} I_{\nu} = \sum_{\nu} (\Lambda_{\nu}^e f'_{\nu} + f_{\nu}). \quad (27)$$

Из формулы (14), записанной в виде

$$T \frac{dS}{dT} = c_v + T \left(\frac{dS}{dV} \right)_T \left(\frac{dV}{dT} \right), \quad (28)$$

получается выражение для электронной теплоемкости при постоянном объеме:

$$c_v = - \sum_{\nu} f'_{\nu} \varepsilon_{\nu} \left(D_{\nu} + I_{\nu} \frac{d\zeta}{dT} \right). \quad (29)$$

$$\sum_{\nu} f'_{\nu} \left(D_{\nu} + I_{\nu} \frac{d\zeta}{dT} \right) = 0. \quad (30)$$

Термическое уравнение состояния электронно-ионной системы записывается на основе исходного равенства

$$p = p_l + p_e, \quad (31)$$

где p_l — вклад в давление от кристаллической решетки ионов, p — внешнее давление. В пределе равных нулю температуры и внешнего давления соответствующая сумма $p_l^0 + p_e^0$ обращается в нуль при объеме, равном V_0 . В соответствии с этим низкотемпературное уравнение состояния имеет вид

$$p = \lambda \frac{(V_0 - V)}{V} + (p_l + p_e) - (p_l^0 + p_e^0), \quad (32)$$

где λ — модуль упругости при $T = 0$, а разности давлений рассматриваются как функции температуры при заданном объеме V . Вклад электронной системы содержится здесь в виде слагаемого в модуле упругости λ и электронного давления p_e — величин, определяемых формулами (17), (18), (25).

Итак, выше приведены основные формулы, описывающие термодинамические свойства электронной системы. Сама конкретная система в этих формулах задается спектром энергии ε_{ν} и функцией ферми-жидкостного взаимодействия $F(\nu, \nu')$, между которыми имеются связи, которых мы коснемся в следующем разделе. Согласно исходным принципам, величины ε_{ν} и $F(\nu, \nu')$ являются функционалами от функции распределения f_{ν} и, следовательно, имеют зависимости от температуры и химического потенциала, явно не определенные в упомянутых формулах. Учет таких зависимостей в рамках развиваемой феноменологии возможен, однако в соответствии с основными положениями одночастичного подхода их, как правило, можно считать достаточно плавными и несущественными при выполнении условия слабого возбуждения

системы. Такое предположение является еще одним принципом ферми-жидкостного подхода.

Нами показано, как на основе ферми-жидкостного подхода осуществляется полное описание электронного вклада в термодинамику на примере системы с двумя термодинамическими переменными. Приведенные формулировки и результаты, по сути, известны, однако серьезные их применения для каких-либо конкретных сложных систем с учетом зависимости функции ферми-жидкостного взаимодействия от квантовых чисел практически не распространены. Как правило, энергетическая зависимость функции $F(\nu, \nu')$ моделируется константой, а в такой модели возможности учета влияния межэлектронного взаимодействия в термодинамике оказываются сильно ограниченными. В теплоемкости влияние взаимодействия тогда вообще не проявляется, в модуле упругости оно сводится к появлению простого множителя. На основании этого иногда делаются необоснованные выводы либо о незначительной роли межэлектронного взаимодействия, либо о неадекватности ферми-жидкостного подхода. На самом деле анализ общих формул (26) и (29) для модуля упругости и теплоемкости показывает, что ферми-жидкостное межэлектронное взаимодействие приводит в общих чертах к определенной перенормировке функции, через которую выражаются термодинамические параметры электронного газа, — плотности состояний электронов с заданной энергией. Плотность состояний $g(\varepsilon)$ в каждой средней величине модифицируется по-своему, причем именно благодаря зависимости ферми-жидкостной перенормировки от энергии. Если в металле вблизи энергии Ферми ε_F функция $g(\varepsilon)$ плавная в масштабе порядка тепловой энергии T , то ферми-жидкостное взаимодействие слабо влияет на вид температурной зависимости, но линейная зависимость теплоемкости от температуры определяется величиной $g(\varepsilon_F)$, а квадратичная зависимость модуля упругости — перенормированной плотностью состояний. Если же функция $g(\varepsilon)$ вблизи энергии Ферми имеет резкую зависимость, немонотонный характер на масштабе T , то температурные зависимости имеют аномальный характер и ферми-жидкостные перенормировки существенны для их описания. Именно низкотемпературные аномалии, наблюдаемые в экспериментах, часто представляются как указание на несостоятельность ферми-жидкостного подхода. Однако серьезных оснований для такого вывода нет, как нет и строгих обоснований исходных формулировок тех моделей, которые обычно предлагаются вместо данного подхода. Таким образом, экспериментальное обнаружение аномальных низкотемпературных зависимостей могло бы служить прежде всего поводом для разработки их объяснения на основе тех положений, которые подтверждены многолетним опытом. Напоминание этого и является целью этой части настоящей работы.

Вклад квантовых неоднородностей электронной плотности в термодинамику и магнитная восприимчивость электронов в рамках ферми-жидкостного подхода

Статистическое описание термодинамических свойств электронов, изложенное в предыдущем разделе, развито без учета неоднородности распределения электронной плотности, обусловленной действием потенциала ионов, межэлектронным взаимодействием и взаимодействиями, обеспечивающими установление равновесия. Связанные с этим квантовые эффекты могут проявляться при низких температурах и должны приниматься во внимание при последовательном определении магнитной восприимчивости через ток намагничивания. В теории таких эффектов одночастичные состояния описываются матрицей плотности, диагональными элементами которой является функция распределения f_v . Функция f_v определена в предыдущем разделе, и именно она входит в термодинамические соотношения (вплоть до формулы (16)), связывающие термодинамические потенциалы. Что же касается рассмотренных в предыдущем разделе вторых вариаций (формулы (17), (18)), описывающих реакцию на силовое воздействие, то в квантовой теории в них входит совокупность недиагональных элементов матрицы плотности $\delta\rho_{vv'}$, с которыми усредняются плотности физических величин. Это касается модуля упругости, а также магнитной восприимчивости, которая без учета недиагональных элементов матрицы плотности не может быть строго рассмотрена. Распространение ферми-жидкостного подхода на изучение квантовых явлений в металлах выполнялось в теории волн в магнитном поле [21,22], магнитной восприимчивости [23,24], акустических свойств [25,26], свойств пленок [20]. Здесь мы коснемся лишь не излагавшейся ранее полной формулировки общих соотношений для статического случая и обобщения термодинамических результатов предыдущего раздела, дополнив их рассмотрением магнитной восприимчивости.

Остановимся сначала на методике определения недиагональных элементов матрицы плотности $\delta\rho_{vv'}$. Исходным является квантовое кинетическое уравнение:

$$(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v)\delta\rho_{vv'} + (f_v - f_{v'})W_{vv'} = i\hbar J_{vv'}[\delta\rho], \quad (33)$$

в котором $J_{vv'}[\delta\rho]$ — квантовый интеграл столкновений, $W_{vv'}$ — матричный элемент энергии возмущения. Для диагональных элементов матрицы плотности уравнение (33) сводится к обращению в нуль интеграла столкновений, которое приводит к равновесному значению $\delta\rho_{vv'}$, равному величине δf_v , фигурирующей в первом разделе. Способы решения уравнения для недиагональных элементов $\delta\rho_{vv'}$ определяются характером физических условий, которыми задается изме-

нение термодинамических параметров, отраженное в энергии взаимодействия $W_{vv'}$. В наиболее распространенной ситуации задаваемый внешними условиями масштаб пространственного изменения макропараметров велик по сравнению с электронными микромасштабами. Тогда вводится локальное равновесие, отвечающее обращению в нуль интеграла столкновений при соответствующей величине $\delta\rho_{vv'}$, равной $\delta\rho_{vv'}^L$. Добавка к $\delta\rho_{vv'}^L$ находится из кинетического уравнения (33), описывающего в данном случае стационарные необратимые процессы. В обычном квазиклассическом приближении это уравнение записывается в виде уравнения для диагональных элементов матрицы плотности (неравновесной добавки к функции δf_v) в результате учета близости квантовых чисел v и v' .

Наше рассмотрение решения уравнения (33) относится к другому случаю, когда недиагональные элементы матрицы плотности описывают роль собственных пространственных неоднородностей в среднем однородной электронной системе. Если сопоставить в уравнении (33) слагаемым, содержащим $\delta\rho_{vv'}$, характерные линейные масштабы неоднородностей, то к слагаемому в левой части следует отнести $1/a$, где a — масштаб рассматриваемых неоднородностей, а к интегралу столкновений — $1/l$, где l — масштаб, определяемый процессами рассеяния (длина свободного пробега). Первый случай крупномасштабных неоднородностей, образованных внешними силами, отвечает выполнению условия $l \ll a$. В рассматриваемом нами случае соотношение обратное: $l \gg a$, и в первом приближении решается уравнение (33) без правой части, что дает

$$\delta\rho_{vv'} = (f_v - f_{v'}) \frac{W_{vv'}}{\varepsilon_v - \varepsilon_{v'}} \equiv f(v, v') W_{vv'}. \quad (34)$$

Добавка к этому выражению, уравнение для которой получается из уравнения (33), описывает роль неоднородностей, связанных с процессами рассеяния.

Запишем матричный элемент $W_{vv'}$ с учетом вкладов полного набора взаимодействий — электрического, магнитного, упругого, ферми-жидкостного:

$$W_{vv'} = \int d\mathbf{r} \left[en_{vv'}(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) - \frac{1}{c} \mathbf{j}_{vv'}(\mathbf{r})\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \Lambda_{vv'}^{ik}(\mathbf{r})u_{ik}(\mathbf{r}) \right] + \sum_{\mu\mu'} F(vv', \mu\mu') \delta\rho_{\mu\mu'}. \quad (35)$$

В этой формуле $\Phi(\mathbf{r})$ и $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ — потенциалы электрического и магнитного полей, $en_{vv'}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{j}_{vv'}(\mathbf{r})$ — матричные элементы плотностей заряда и тока электронов, $\Lambda_{vv'}^{ik}(\mathbf{r})$ — матричный элемент оператора де-

формационного потенциала, $u_{ik}(\mathbf{r})$ — тензор деформации, $F(vv', \mu\mu')$ — функция ферми-жидкостного взаимодействия для недиагональных матричных элементов. Электрический потенциал $\Phi(\mathbf{r})$ следует находить из уравнения Пуассона, включая в него среднюю плотность заряда, возникающую при рассматриваемых возмущениях. Если масштаб изменения функции $\Phi(\mathbf{r})$ того же порядка или больше масштаба учитываемых неоднородностей, то уравнение Пуассона сводится к условию электронейтральности возмущенной электронной системы, которое аналогично уравнению для добавки к химическому потенциалу $\delta\zeta(\mathbf{r}) = -e\Phi(\mathbf{r})$, записанному с учетом неоднородностей. Тогда в уравнениях (34), (35) легко усмотреть обобщение соотношений (19)–(23) без учета вклада вариаций температуры. Температурную добавку формально также можно включить в выражение (35), однако рассмотрение неоднородной вариации температуры с масштабом изменения, меньшим длины свободного пробега l , требует дополнительного обоснования. Не касаясь этого вопроса, проводим учет неоднородностей только для изотермических процессов. Введем эффективные матричные элементы, записывая выражение (35) следующим образом:

$$W_{vv'} = \int d\mathbf{r} \left[-\frac{1}{c} \mathbf{j}_{vv'}^e(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \Lambda_{vv'}^{eik}(\mathbf{r}) u_{ik}(\mathbf{r}) - n_{vv'}^e(\mathbf{r}) \delta\zeta(\mathbf{r}) \right] \quad (36)$$

Тогда с учетом формулы (34) получаем уравнения

$$\Lambda_{vv'}^{eik}(\mathbf{r}) = \Lambda_{vv'}^{ik}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu, \mu'} F(vv', \mu\mu') f(\mu, \mu') \Lambda_{\mu\mu'}^{eik}(\mathbf{r}), \quad (37)$$

$$\mathbf{j}_{vv'}^e(\mathbf{r}) = \mathbf{j}_{vv'}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu, \mu'} F(vv', \mu\mu') f(\mu, \mu') \mathbf{j}_{\mu\mu'}^e(\mathbf{r}), \quad (38)$$

$$n_{vv'}^e(\mathbf{r}) = n_{vv'}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu, \mu'} F(vv', \mu\mu') f(\mu, \mu') n_{\mu\mu'}^e(\mathbf{r}). \quad (39)$$

Эти уравнения применялись в работах [22,23] для изучения квантовых эффектов в магнитном поле. Особенно важное значение имеет уравнение (38) для эффективной плотности тока. В работах [22,24] показано, что его следствием является равенство

$$\frac{l}{i\hbar} (\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) n_{vv'}(\mathbf{r}) = \text{div } \mathbf{j}_{vv'}(\mathbf{r}) + \sum_{\mu, \mu'} F(vv', \mu\mu') \frac{l}{i\hbar} (f_{\mu'} - f_{\mu}) n_{\mu\mu'}(\mathbf{r}), \quad (40)$$

которое позволяет в явном виде связать некоторые параметры энергетического спектра электронов с функ-

цией ферми-жидкостного взаимодействия. В нем содержится уравнение Ландау для эффективной массы [7] или общая связь эффективной скорости электрона с диагональным элементом импульса. Диагональная по орбитальным квантовым числам вихревая спиновая часть \mathbf{j}^e связана с энергией спинового расщепления $\hbar\Omega_{0\alpha} = \varepsilon_{\alpha+} - \varepsilon_{\alpha-}$, уравнение для которой, как показано в работе [22], также следует из (38):

$$\hbar\Omega_{0\alpha} = -2\mu_0 B + 2 \sum_{\alpha'} F(\alpha + \alpha', \alpha' + \alpha' -) (f_{\alpha'+} - f_{\alpha'-}), \quad (41)$$

где μ_0 — магнетон Бора, B — индукция однородного магнитного поля. Аналогичное уравнение справедливо и для энергии спонтанной спиновой поляризации электронов в магнитоупорядоченной системе [27].

К выражению (36) следует теперь добавить упомянутое выше условие электронейтральности:

$$\sum_v f_v n_{vv}(\mathbf{r}) u_{ii}(\mathbf{r}) + \sum_{vv'} \delta\rho_{vv'} n_{vv'}(\mathbf{r}) = 0, \quad (42)$$

которое служит для исключения функции $\delta\zeta(\mathbf{r})$. В итоге термодинамические соотношения содержат два внешних параметра (функции): тензор деформации $u_{ik}(\mathbf{r})$, заменивший параметр δv , и векторный потенциал $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ или вектор магнитной индукции $\mathbf{b}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$. В соответствии с этим равенство (17), описывающее изотермическую реакцию на всестороннее напряжение, заменяется двумя равенствами:

$$[\delta^2(E - TS)]^u = \int d\mathbf{r} \left[\sum_v f_v W_{vv} n_{vv}(\mathbf{r}) u_{ii}(\mathbf{r}) + \sum_{vv'} \delta\rho_{vv'} \Lambda_{vv'}^{ik}(\mathbf{r}) u_{ik}(\mathbf{r}) \right]. \quad (43)$$

$$[\delta^2(E - TS)]^A = -\frac{1}{c} \int d\mathbf{r} \left[\sum_v f_v \delta \mathbf{j}_{vv}(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \sum_{vv'} \delta\rho_{vv'} \mathbf{j}_{vv'}(\mathbf{r}) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right], \quad (44)$$

где

$$\delta \mathbf{j}_{vv}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c} \int d\mathbf{r}' Q_v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') \quad (45)$$

— добавка к плотности тока в магнитном поле, которая появляется при изменении импульса в магнитном поле, $Q_v(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — тензор, для свободных электронов равный $Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = (e^2/m) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, где m — масса электрона. Равенства (42)–(45) определяют нелокальные функции термодинамической реакции — тензоры модулей упругости и магнитной восприимчивости. Отдельные выра-

жения для каждого из этих тензоров можно просто записать, когда отсутствуют слагаемые, которые связывают друг с другом равенства (43), (44) и отличны от нуля лишь в квантующем магнитном поле или при магнитном упорядочении. В этом случае тензор модулей упругости и уравнение для $\delta\zeta(\mathbf{r})$ имеют вид

$$\lambda_{iklm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\nu} f_{\nu} n_{\nu\nu}(\mathbf{r}) \delta_{ik} \left\{ \Lambda_{\nu\nu}^{elm}(\mathbf{r}') - \int d\mathbf{r}'' n_{\nu\nu}^e(\mathbf{r}'') \frac{\delta\zeta(\mathbf{r}'')}{\delta u_{lm}(\mathbf{r}')} \right\} + \sum_{\nu\nu'} f(\nu, \nu') \Lambda_{\nu\nu'}^{ik}(\mathbf{r}) \left\{ \Lambda_{\nu\nu'}^{elm}(\mathbf{r}') - \int d\mathbf{r}'' n_{\nu\nu'}^e(\mathbf{r}'') \frac{\delta\zeta(\mathbf{r}'')}{\delta u_{lm}(\mathbf{r}')} \right\}, \quad (46)$$

$$\sum_{\nu\nu'} f(\nu, \nu') n_{\nu\nu}(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' n_{\nu\nu'}^e(\mathbf{r}') \delta\zeta(\mathbf{r}') = \sum_{\nu} f_{\nu} n_{\nu\nu}(\mathbf{r}) u_{ll}(\mathbf{r}) + \sum_{\nu\nu'} f(\nu, \nu') n_{\nu\nu'}(\mathbf{r}) \times \int d\mathbf{r}' \Lambda_{\nu\nu'}^{elm}(\mathbf{r}') u_{lm}(\mathbf{r}'). \quad (47)$$

Нетрудно видеть, что получено естественное обобщение формул (26), (27). Переход к случаю однородной системы приводит к формуле для электронного вклада в тензор модулей упругости при произвольной однородной деформации.

При вычислении магнитной восприимчивости исходным является выражение для плотности тока намагничивания, которое содержится в формуле (44):

$$\text{rot } \mathbf{M}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c^2} \int d\mathbf{r}' \left[\sum_{\nu} f_{\nu} Q_{\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') + \sum_{\nu\nu'} f(\nu, \nu') \mathbf{j}_{\nu\nu'}(\mathbf{r}) (\mathbf{j}_{\nu\nu'}^e(\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}')) \right]. \quad (48)$$

В таком виде оно было получено в работах [23,24]. Векторный потенциал здесь следует выразить через вектор магнитной индукции $\mathbf{b}(\mathbf{r})$ согласно определению $\mathbf{b}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$, $\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$, тогда и определяется тензор нелокальной магнитной восприимчивости $\chi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ как коэффициент линейной связи между $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ и $\mathbf{b}(\mathbf{r})$. Простое явное выражение легко получить для спиновой части восприимчивости без учета спин-орбитального взаимодействия. Введем спиновые части матричных элементов плотности тока:

$$\mathbf{j}_{\nu\nu'}^s(\mathbf{r}) = -2\mu_0 c \text{rot}(\mathbf{s}_{\sigma\sigma'} n_{\alpha\alpha'}(\mathbf{r})), \quad (49)$$

$$\mathbf{j}_{\nu\nu'}^{es}(\mathbf{r}) = -2\mu_0 c \text{rot}(\mathbf{s}_{\sigma\sigma'} n_{\alpha\alpha'}^e(\mathbf{r})).$$

Тогда из формулы (48) получаем нелокальную спиновую магнитную восприимчивость в виде

$$\chi^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\mu_0^2 \sum_{\alpha\alpha'\sigma} f(\alpha\sigma, \alpha'\sigma) n_{\alpha'\alpha}(\mathbf{r}) n_{\alpha\alpha'}^e(\mathbf{r}'). \quad (50)$$

Этот результат хорошо известен, особенно широко распространена формула без учета неоднородностей и зависимости функции ферми-жидкостного взаимодействия от квантовых чисел. Здесь, как и в конце предыдущего раздела, можно обратить внимание на то, что касается влияния ферми-жидкостного взаимодействия на температурные зависимости термодинамических величин. Температурная зависимость магнитной восприимчивости определяется плотностью состояний электронов, перенормированной ферми-жидкостным взаимодействием, и такая перенормировка может быть существенной не только в количественном, но и в качественном отношении. Что касается орбитального вклада в магнитную восприимчивость, то на основе формулы (48) без постоянного магнитного поля он подробно рассмотрен в работе [24], а влияние на него ферми-жидкостных квантовых эффектов в магнитном поле исследовалось в работах [23].

В заключение разделов статьи, посвященных обзорному изложению основ квантового ферми-жидкостного подхода, целесообразно, дополняя уже сделанные выше ссылки, назвать ряд теоретических результатов, уже давно полученных в рамках этого подхода. Ограничиваясь в основном результатами, относящимися к термодинамике, отметим прежде всего теорию физических свойств магнитоупорядоченных металлов, развитую в работах [28–31], и теорию квантовых аномалий магнитных и упругих свойств при сверхнизких температурах [32]. Получен также ряд результатов в области физики проводящих слоев [33] и эффектов поверхностного магнитного квантования [34]. В целом совокупность упомянутых результатов уже давно продемонстрировала широту круга эффектов, обусловленных межэлектронным взаимодействием, и серьезные возможности их описания в рамках изложенного подхода. Можно также отметить, что широко распространенные в теоретических работах способы решения того же круга задач, основанные на использовании формализма квантовой теории поля, в области применимости ферми-жидкостного подхода могут приводить (при достижении того же уровня обоснованности) лишь к тем же физическим результатам, изложенным в другой феноменологии. Если же речь идет о выходе за рамки определенной области применимости, то квантовополевые методики в таких случаях принято использовать на основе исходных моделей, не имеющих серьезных обоснований, так что степень надежности полученных результатов по отно-

шению к реальным объектам часто требует отдельного доказательства.

Описание низкотемпературных эффектов гибридизации электронных состояний на донорных примесях переходных элементов в рамках ферми-жидкостного подхода

В данном разделе рассмотрим применение квантового ферми-жидкостного подхода для изучения роли межэлектронного взаимодействия в сравнительно новом круге проблем, относящемся в определенной степени к низкотемпературной электронной физике как металлов, так и полупроводников. Объектом исследования, сближающим упомянутые области (металлы и полупроводники), является полупроводник, легированный донорными примесями, которые создают достаточно большую концентрацию электронов в полосе проводимости в основном состоянии, т.е. при низкой температуре. Такая ситуация осуществляется, когда донорный энергетический уровень примеси оказывается в полосе проводимости кристалла. В актуальном случае донорной примесью является атом переходного d -элемента, замещающий атом металла в полупроводниковом соединении, тогда донорным энергетическим уровнем оказывается d -уровень в полосе проводимости. Такой объект в отношении электронных свойств в определенной степени аналогичен металлу с малой концентрацией электронов, регулируемой концентрацией донорной примеси. Важную роль при этом может играть гибридизация электронных состояний с энергиями, близкими к донорному уровню. Гибридизованные состояния обладают электронной плотностью, в которой содержатся доли локализации и свободного движения, и описываются теорией резонансного рассеяния. Если энергия Ферми электронов при изменении концентрации доноров оказывается в интервале гибридизации, то низкотемпературные зависимости термодинамических и кинетических величин от концентрации примесей и температуры являются немонотонными, аномальными. Теоретическое описание такого рода эффектов развито в работах [35], а экспериментальные данные, подтверждающие их наблюдение, приведены в статьях [36–39].

Проявления гибридизации состояний в термодинамических величинах обусловлены тем, что каждое состояние дает два вклада, происходящих от локализованной и однородной частей пространственного распределения электронной плотности. В электронных явлениях переноса играет роль и другой фактор — резонансное рассеяние на донорных примесях. Ограничиваясь термодинамическими явлениями, примем упрощенную изотропную модель электронных состояний, в которой квантовыми числами можно считать импульсы, от направления которых энергия не зависит.

Рассмотрим плотность состояний электронов с данной энергией на основе уравнения (39) для матричных элементов электронной плотности, усредненного по направлениям импульсов. Суммируем по импульсам данное уравнение для диагональных матричных элементов, переходя обычным образом к интегрированию по энергии и вводя плотность состояний. Тогда в отсутствие гибридизации получается следующее уравнение для плотности состояний $g_e(\epsilon)$, перенормированной ферми-жидкостным взаимодействием:

$$g_e(\epsilon) = g^c(\epsilon) + \int d\epsilon' g^c(\epsilon) f'(\epsilon') F(\epsilon, \epsilon') g_e(\epsilon'), \quad (51)$$

где $g^c(\epsilon)$ — плотность состояний электронов проводимости. Это уравнение фактически совпадает с уравнением (23) для $I(\epsilon)$, если записать $g_e(\epsilon) = I(\epsilon)g^c(\epsilon)$ и разделить все слагаемые на $g^c(\epsilon)$. Явление гибридизации имеет место в определенном интервале энергий $\epsilon_r - \Gamma < \epsilon < \epsilon_r + \Gamma$, близких к энергии резонансного донорного уровня ϵ_r , и отражается прежде всего в том, что в первом слагаемом правой части уравнения (51) функция $g^c(\epsilon)$ заменяется на

$$g^h(\epsilon) = g^c(\epsilon) + n_i \omega^i(\epsilon), \quad (52)$$

где n_i — концентрация примесей, $\omega^i(\epsilon)$ — функция, описывающая вклад локализации в плотность состояний. В теории резонансного рассеяния показано, что в узкой окрестности резонансной энергии зависимость $\omega^i(\epsilon)$ описывается функцией Лоренца $(\Delta / \pi) / [(\epsilon - \epsilon_r)^2 + \Delta^2]$ с шириной $2\Delta \ll \epsilon_r$. Вопросы, связанные с описанием термодинамического равновесия системы электронов в гибридизованных состояниях, в частности, с определением энергии Ферми (химического потенциала) и концентрации электронов проводимости на основе использования формулы (52), рассмотрены в работах [35].

Усредненные динамические величины, фигурирующие в термодинамике (деформационный потенциал, магнитный момент), в гибридизованных состояниях также содержат отдельные вклады однородной и локализованной частей электронной плотности. В частности, плотность деформационного потенциала, получаемая усреднением уравнения (37) по направлениям импульса и в отсутствие гибридизации равная $\Lambda(\epsilon)g^c(\epsilon)$, имеет вид $\Lambda^c(\epsilon)g^c(\epsilon) + n_i \Lambda^i(\epsilon)\omega^i(\epsilon)$. Коэффициенты $\Lambda^c(\epsilon)$ и $\Lambda^i(\epsilon)$ описывают влияние деформации на однородную и локализованную части электронной плотности (тензорные индексы для простоты не выписываем). Подобным образом записывается вклад ферми-жидкостного взаимодействия в уравнении для определения эффективной плотности состояний $g_e^h(\epsilon)$, в которое переходит уравнение (51) при учете гибридизации. Запишем $g_e^h(\epsilon)$ в виде суммы

$$g_e^h(\varepsilon) = I_c(\varepsilon)g^c(\varepsilon) + n_i I_i(\varepsilon)\omega^i(\varepsilon). \quad (53)$$

Тогда для функций $I_c(\varepsilon)$ и $I_i(\varepsilon)$ получаем следующую систему уравнений:

$$I_c(\varepsilon) = 1 + \int d\varepsilon' f'(\varepsilon') [g^c(\varepsilon') F_{c_c}(\varepsilon, \varepsilon') I_c(\varepsilon') + n_i \omega^i(\varepsilon') F_{c_i}(\varepsilon, \varepsilon') I_i(\varepsilon')], \quad (54)$$

$$I_i(\varepsilon) = 1 + \int d\varepsilon' f'(\varepsilon') [g^c(\varepsilon') F_{i_c}(\varepsilon, \varepsilon') I_c(\varepsilon') + n_i \omega^i(\varepsilon') F_{i_i}(\varepsilon, \varepsilon') I_i(\varepsilon')]. \quad (55)$$

Ферми-жидкостное взаимодействие характеризуется здесь четырьмя функциями, образующими матрицу, которая описывает влияние взаимодействия, смешивающего вклады двух различных компонент состояний в плотность состояний. Особенно существенны «перекрестные» связи, приводящие, в частности, к проявлениям свойств локализации во вкладах электронов проводимости. Равенства (52)–(54) служат для определения электронной плотности состояний, которая необходима для расчета термодинамических величин по формулам, приведенным в первом разделе. Нетрудно видеть, что подобного же рода системы равенств справедливы для деформационного потенциала и величины $D(\varepsilon)$, которые входят в формулы, описывающие температурные и концентрационные зависимости теплоемкости и упругих модулей системы электронов в гибридных состояниях. Способ и принципиальные моменты получения относящихся к этому основных соотношений фактически намечены выше. Конкретные исследования в рамках изложенного общего подхода были выполнены применительно к магнитной восприимчивости и g -фактору электронов проводимости в работах [40,41]. Основным результатом качественного характера, проанализированный в этих исследованиях, состоял в обнаружении значительной немонотонности, низкотемпературных экстремумов в концентрационной и температурной зависимостях примесной спиновой магнитной восприимчивости. Этот результат нетрудно предсказать и при рассмотрении приведенных выше формул для плотности состояний. Фрагментом в них является величина

$$\eta = \int d\varepsilon' f'(\varepsilon') \omega^i(\varepsilon'), \quad (56)$$

в которой содержится интегрирование локализационного пика в плотности состояний с производной функции Ферми. Именно этот фрагмент и приводит к низкотемпературным аномалиям термодинамических величин. Физическая причина такой аномалии состоит в немонотонности заполнения и опустошения локализационного пика термически возбужденными

электронами. О возможности подобного происхождения низкотемпературных аномалий упоминалось в первом разделе, и здесь, таким образом, дано обоснование реализации такой возможности.

В рамках ферми-жидкостного подхода решается и проблема формулировки условий существования и уравнений для спонтанной спиновой поляризации локализованной электронной плотности гибридных состояний. Речь идет, по существу, об общей феноменологической трактовке локализованных на примесях спиновых моментов, рассмотренных в известной работе Андерсона [42] и в большом числе дальнейших исследований. В излагаемом нами ферми-жидкостном подходе основу для рассмотрения упомянутой проблемы составляет приведенное выше уравнение (38) для матричных элементов плотности тока, из которого следует уравнение для эффективной спиновой плотности, сформулированное в работе [22]. Мы применяем это уравнение для электронов в гибридных состояниях, используя изложенные выше представления об их описании.

Спиновая поляризация электронных состояний сопровождается соответствующим расщеплением энергетических уровней гибридных состояний. Это означает, что к энергии электрона ε добавляется слагаемое $\sigma\beta(\varepsilon)/2$, зависящее от спинового индекса $\sigma = \pm$. Мы считаем, что исходный резонансный донорный уровень энергии не расщеплен по спину, и поляризация локализованной электронной плотности возникает только при заполнении резонансного интервала энергий. Для состояний вне резонансного интервала возможная поляризация состояний электронов проводимости определяется уравнением (41):

$$\beta_c(\varepsilon) = \int d\varepsilon' g^c(\varepsilon) \psi_c(\varepsilon, \varepsilon') \times \left[f\left(\varepsilon' + \frac{\beta_c(\varepsilon')}{2}\right) - f\left(\varepsilon' - \frac{\beta_c(\varepsilon')}{2}\right) \right], \quad (57)$$

где $\psi_c(\varepsilon, \varepsilon')$ — недиагональная по спиновому индексу часть функции ферми-жидкостного взаимодействия, происходящая от функции $F(\alpha + \alpha-, \alpha' + \alpha-)$, которая была введена в уравнении (41). При формулировке уравнения для резонансного интервала энергий производится преобразование, аналогичное переходу от уравнения (51) к уравнениям (54), (55). Величина $\beta(\varepsilon)$ записывается в виде суммы $\beta(\varepsilon) = \beta_c(\varepsilon) + \beta_i(\varepsilon)$, и для ее слагаемых получаем систему уравнений

$$\beta_c(\varepsilon) = \int d\varepsilon' \left[f\left(\varepsilon' + \frac{\beta(\varepsilon')}{2}\right) - f\left(\varepsilon' - \frac{\beta(\varepsilon')}{2}\right) \right] \times [g^c(\varepsilon') \psi_c(\varepsilon, \varepsilon') + n_i \omega^i(\varepsilon') \psi_{c_i}(\varepsilon, \varepsilon')], \quad (58)$$

$$\beta_i(\varepsilon) = \int d\varepsilon' \left[f\left(\varepsilon' + \frac{\beta(\varepsilon')}{2}\right) - f\left(\varepsilon' - \frac{\beta(\varepsilon')}{2}\right) \right] \times [g^c(\varepsilon')\psi_{ic}(\varepsilon, \varepsilon') + n_i\omega^i(\varepsilon')\psi_i(\varepsilon, \varepsilon')]. \quad (59)$$

Обозначения здесь аналогичны введенным в (54), (55). Если не учитывать обычно малую поляризацию однородной части электронной плотности ($\beta_c(\varepsilon) = 0$), то остается только уравнение (59), которое определяет локализованный на примеси спиновый момент. Если считать функцию $\psi_i(\varepsilon, \varepsilon')$ константой, то полученное уравнение отвечает известным результатам Андерсона [42]. Нетрудно понять, что достаточное условие образования локализованного момента сводится к требованию выполнения неравенства $n_i|\psi|/\Delta > 1$.

Итак, в этом разделе сформулированы основы для описания низкотемпературных ферми-жидкостных эффектов в физических свойствах системы электронов в гибридизированных состояниях. В экспериментах по квантовым осцилляциям Шубникова–де Гааза в селениде ртути с примесями железа [43] получены свидетельства наблюдения одного из таких эффектов — минимума концентрационной зависимости g -фактора электронов проводимости [41]. Можно ожидать, что дальнейшие исследования в этом направлении позволят получить новые данные о межэлектронном взаимодействии.

Заключение

В настоящей статье основное внимание сосредоточено на тех результатах применения ферми-жидкостного подхода, которые имеют общий характер и не ограничены модельными предположениями или учетом особенностей конкретных объектов. Приведены формулы для описания низкотемпературных термодинамических параметров, которые получены без конкретизации энергетической плотности состояний, функции ферми-жидкостного взаимодействия и других характеристик одночастичных состояний. Это соответствовало цели статьи — напомнить и показать возможности данного подхода и необходимость серьезного отношения к нему при разработке теоретических трактовок электронных явлений в определенной области. Надеемся, что достижению такой цели помогут и те результаты, которые приведены в последнем разделе статьи.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 06-02-16919.

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. IX, Наука, Москва (1978); Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика*, часть 2, Наука, Москва (1978).
2. А.А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, Наука, Москва (1987).
3. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).
4. В.А. Фок, *Zs. fur Phys.* **61**, 126 (1930); *Труды ГОИ* **5**, вып. 51 (1931); Юбилейный сборник АН СССР, посвященный 30-летию Октя. революции, ч. 1, 255 (1947).
5. В.А. Фок, *Начала квантовой механики*, Наука, Москва (1976).
6. Д. Бом, *Общая теория коллективных переменных*, Мир, Москва (1964); Д. Пайнс, *Элементарные возбуждения в твердых телах*, Мир, Москва (1965).
7. Д.Н. Зубарев, *ЖЭТФ* **25**, 548 (1953); В.П. Силин, *Труды ФИАН* **6**, 199 (1955); *ФММ* **3**, 193 (1956).
8. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **30**, 1058 (1956).
9. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **32**, 59 (1957).
10. В.П. Силин, *ЖЭТФ* **33**, 495 (1957).
11. В.П. Силин, *ЖЭТФ* **35**, 1243 (1958).
12. К.П. Гуров, *Основания кинетической теории*, Наука, Москва (1966).
13. Л.Д. Ландау, *ЖЭТФ* **35**, 97 (1958).
14. А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков, И.Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Наука, Москва (1962).
15. J.M. Luttinger and P. Nozieres, *Phys. Rev.* **127**, 1423 (1962).
16. P. Nozieres, *Theory of Interacting Fermi-Systems*, New York (1964).
17. Л. Каданов, Г. Бейм, *Квантовая статистическая механика*, Мир, Москва (1964).
18. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, *Теория квантовых жидкостей*, Мир, Москва (1967).
19. В.П. Силин, *ЖЭТФ* **38**, 977 (1960); *ФММ* **29**, 681 (1970).
20. А.С. Кондратьев, А.Е. Кучма, *Электронная жидкость нормальных металлов*, Изд-во Ленинградского государственного университета, Ленинград (1980).
21. П.С. Зырянов, В.И. Окулов, В.П. Силин, *ЖЭТФ* **58**, 1295 (1970).
22. V.I. Okulov and E.A. Pamyatnykh, *Phys. Status Solidi* **60**, 771 (1973).
23. В.Н. Багаев, В.И. Окулов, Е.А. Памятных, *ФНТ* **4**, 742 (1978) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **4**, 354 (1978)]; V.N. Bagaev, V.I. Okulov, and E.A. Pamyatnykh, *J. Low Temp. Phys.* **41**, 463 (1980).
24. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, *ФММ* **8**, 5 (1990).
25. Н.П. Зырянова, В.И. Окулов, В.П. Силин, Сб.: *Проблемы физики твердого тела*, УНЦ АН СССР (1975).
26. В.И. Окулов, В.П. Силин, *ФММ* **55**, 837 (1983).
27. А.А. Абрикосов, И.Е. Дзялошинский, *ЖЭТФ* **35**, 771 (1958).
28. В.П. Силин, *Физика многочастичных систем* **6**, 37 (1984).
29. В.М. Зверев, В.П. Силин, *ЖЭТФ* **81**, 1925 (1981).
30. Ф.И. Долинин, Е.А. Памятных, *ФММ* **53**, 238 (1982).

31. А.С. Кондратьев, В.М. Уздин, *Электронная жидкость магнитоупорядоченных металлов*, Изд-во Ленинградского государственного университета, Ленинград (1988).
32. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, *Низкотемпературные магнитные квантовые осцилляции в металлах*, Изд-во Уральского университета, Екатеринбург (2004).
33. А.С. Кондратьев, А.Е. Кучма, Р.П. Мейланов, *ФММ* **41**, 742 (1976).
34. В.П. Силин, О.М. Толкачев, *ЖЭТФ* **70**, 639 (1976).
35. В.И. Окулов, *ФНТ* **30**, 1194 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 897 (2004)]; *ФММ* **100**, 23 (2005).
36. В.И. Окулов, Л.Д. Сабирзянова, К.С. Сазонова, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **30**, 441 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 328 (2004)].
37. В.И. Окулов, Г.А. Альшанский, В.Л. Константинов, А.В. Королев, Э.А. Нейфельд, Л.Д. Сабирзянова, Е.А. Памятных, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **30**, 558 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 417 (2004)].
38. В.И. Окулов, А.В. Гергерт, Т.Е. Говоркова, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, Л.Д. Сабирзянова, С.Ю. Паранчич, М.Д. Андрийчук, В.Р. Романюк, *ФНТ* **31**, 1143 (2005) [*Low Temp. Phys.* **31**, 872 (2005)].
39. В.И. Окулов, Т.Е. Говоркова, В.В. Гудков, И.В. Жевстовских, А.В. Королев, А.Т. Лончаков, К.А. Окулова, Е.А. Памятных, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **33**, 282 (2007) [*Low Temp. Phys.* **33**, 207 (2007)].
40. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, А.В. Гергерт, *ФММ* **101**, 11 (2006).
41. В.И. Окулов, Е.А. Памятных, Г.А. Альшанский, *ФНТ* **35**, 194 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 146 (2009)].
42. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **124**, 41 (1961).
43. Г.А. Альшанский, Т.Е. Говоркова, В.И. Окулов, А.В. Королев, С.Ю. Паранчич, *ФНТ* **34**, 613 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 487 (2008)].

Treatment of low-temperature effects in metals and doped semiconductors on the basis of quantum electron liquid theory

V.I. Okulov, E.A. Pamyatnykh, and V.P. Silin

The starting statements of the quantum electron liquid theory as the basis for theoretical description of the contribution of low-lying excited one-particle states of the electron system to the low-temperature properties of solids are formulated. This quantum-mechanical formulation does not define concretely the initially real one-particle basis, therefore it allows one to consider the role of electron–electron interaction under the conditions of orbital quantization and other important quantum phenomena. The derivation of the basic thermodynamic relations is briefly described and the formulas for electron specific heat, elastic modulus and magnetic susceptibility obtained in the framework of the Fermi-liquid approach without generally adopted model assumptions are given. The third section concerns the application of the theory in the problem of description of the role of electron–electron interaction in the thermodynamic phenomena in the systems with hybridized electron states, which are formed by the donor impurity resonance levels in the conduction band of a crystal. An equation for spontaneous localized spin magnetic moment in hybridized states is stated.

PACS: 72.20.Dp General theory, scattering mechanisms;
72.20.Fr Low-field transport and mobility; piezoresistance;
72.80.Ey III–V and II–VI semiconductors.

Keywords: electron theory, electron liquid, electron specific heat, hybridized states.