Письма в ЖЭТФ, том 33, вып.2, стр. 93 – 97 *20 января 1981 г.*

ДИАМАГНЕТИЗМ ЗОННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В МАКРОСКОПИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Т.А.Онищенко

Показано, что орбитальное движение зонных электронов в макроскопически неоднородном кристалле может привести к аномально сильному диамагнетизму.

Макроскопическая неоднородность кристалла, связанная, например, с деформациями и электрическими полями, приводит к зависимости электронного спектра от пространственных координат. Если глубина пространственной модуляции энергии значительно превышает ширину зоны $\mathcal{E}_0$, а запрещенные полосы энергии E_g достаточно широки, то волновые функции электронов оказываются локализованными. Такая локализация электронов частично заполненных зон может привести к диамагнетизму, на несколько порядков превышающему диамагнетизм Ландау.

Поясним это на простейшей модели – кубическом кристалле, энергетический спектр электронов проводимости в котором имеет вид

$$\mathcal{E}(k_x, k_y, k_z) = \mathcal{E}(k_x) + \mathcal{E}(k_y) + \mathcal{E}(k_z), \quad \mathcal{E}\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = \mathcal{E}(k),$$

$$\int_{-\pi/a}^{\pi/a} \mathcal{E}(k)\,dk = 0$$

a – размер элементарной ячейки. Таким спектром обладают зонные электроны в приближении сильной связи, а также в модельном кристаллическом потенциале вида $V(x) + V(y) + V(z)$, $V(x + a) = V(x)$. Поместим кристалл в однородные электрическое $\mathbf{E} \parallel 0X$ и магнитное $\mathbf{B} \parallel 0Z$ поля. Напишем гамильтониан без учета спинов:

$$\mathcal{H} = \mathcal{E}\left(k_x,\ k_y - \frac{eB}{\hbar c}x,\ k_z\right) + Fx, \quad F = -eE.$$

Пусть $E_g^3 F^{-2} \left| \dfrac{\partial^2}{\partial k_x^2} \mathcal{E}(k_x) \right|^{-1} \gg 1$, тогда межзонными переходами в электрическом поле можно пренебречь, и пусть $\left(\dfrac{\hbar c}{eB\sqrt{a}}\right)^{2/3} \gg$ $\gg \dfrac{\mathcal{E}_0}{|F|} \gg a$, а длина свободного пробега $l > \dfrac{\mathcal{E}_0}{|F|}$. При $B = 0$ энергетические уровни есть

$$E_{N, K_y, K_z} = FaN + \mathcal{E}(K_y) + \mathcal{E}(K_z), \tag{1}$$

а соответствующие волновые функции локализованы по x в областях размером $\mathcal{E}_0/F$ с центрами в точках $x = aN$, N – целое число. Вычислим сдвиг уровня (N, K_y, K_z) при включении магнитного поля B

с точностью до B^2 . Представим $\mathcal{H}$ в виде $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{E}\left(k_x, k_y - \frac{eB}{\hbar c} aN, k_z\right) + iF \frac{\partial}{\partial k_x},$$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{eB}{\hbar c} \frac{\partial \mathcal{E}\left(k_y - \frac{eB}{\hbar c} aN\right)}{\partial k_y} \left(i \frac{\partial}{\partial k_x} - aN\right), \qquad (2)$$

$$\mathcal{H}_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{eB}{\hbar c}\right)^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial k_y^2} \mathcal{E}\left(k_y - \frac{eB}{\hbar c} aN\right)\right]\left(i \frac{\partial}{\partial k_x} - aN\right)^2.$$

Собственные функции $\mathcal{H}_0$ имеют вид

$$\Psi_{N, K_y, K_z}(k_x, k_y, k_z) = \left[\frac{a}{2\pi} \delta\left(K_y + \frac{eB}{\hbar c} aN - k_y\right) \times\right.$$

$$\left.\times\ \delta\left(K_z - k_z\right)\right]^{1/2} \exp \int_{-\pi/a}^{k_x} [-FaN + \mathcal{E}(k')] \frac{i}{F} dk'_x, \qquad (3)$$

а уровни энергии совпадают с (1). $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ учтем как возмущения

$$\Delta E_{N, K_y, K_z} = \Delta E^{(1)} + \Delta E^{(2)} + \Delta E^{(3)} = \langle N, K_y, K_z | \mathcal{H}_1 | N, K_y, K_z \rangle +$$

$$+ \sum_{N', K'_y, K'_z}' |\langle N', K'_y, K'_z | \mathcal{H}_1 | N, K_y, K_z \rangle|^2 [E_{N, K_y, K_z} -$$

$$- E_{N', K'_y, K'_z}]^{-1} + \langle N, K_y, K_z | \mathcal{H}_2 | N, K_y, K_z \rangle \qquad (4)$$

у $\mathcal{H}_1$ отличны от нуля только матричные элементы вида $\langle N + m,\ K_y - \frac{eB}{\hbar c} am,\ K_z | \mathcal{H}_1 | N, K_y, K_z \rangle$, $m = \pm 1, \pm 2, \ldots$, величина которых не зависит от знака m. $\Delta E^{(1)} = 0$. Вследствие неограниченности и эквидистантности по N спектра E_{N, K_y, K_z} $\Delta E^{(2)}$ $\frac{1}{|F|a} \left| \mathcal{E}_0 \times \left(\frac{eB}{\hbar c} a \frac{\mathcal{E}_0}{F}\right)^2 \right|^2 << \Delta E^{(3)}$.

$$\Delta E_{N, K_y, K_z} \approx \Delta E^{(3)} = \langle N, K_y, K_z | \mathcal{H}_2 | N, K_y, K_z \rangle =$$

$$= \frac{\mathcal{E}_0}{2} \left(\frac{eB}{\hbar c} a \frac{\mathcal{E}_0}{F}\right)^2 A(K_y), \qquad (5)$$

$$A(K_y) = (2\pi a \mathcal{E}_0^3)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{E}(K_y)}{\partial K_y^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} [\mathcal{E}(k)]^2 dk, \quad |A(k_y)| \sim 1.$$

Мы не рассматриваем различных процессов рассеяния электронов, учет которых привел бы к появлению электрического тока, что не изменило бы (5) при условии $l > \mathcal{E}_o/|F|$. Пусть концентрация $n \ll a^{-3}$, $T \ll \mathcal{E}_o$, $\mathcal{E}(k_o) = \min\{\mathcal{E}(k)\}$. Тогда заполнены лишь состояния с $|K_{y,z} - k_o| \ll a^{-1}$, причем числа заполнения η_{N, K_y, K_z} не зависят от N ввиду электронейтральности системы, и увеличение энергии системы при включении B есть

$$\frac{1}{V}\,\Delta E = \frac{1}{2}\,\mathcal{E}_o\left(\frac{eB}{\hbar c}\,a\,\frac{\mathcal{E}_o}{F}\right)^2 n A(k_o),\quad A(k_o) > 0. \tag{6}$$

При отсутствии макроскопической неоднородности, в данном случае электрического поля, $\Delta E/V$ определялась бы диамагнетизмом Ландау [1] и отличалась бы множителем порядка $(F/\mathcal{E}_o)^2 n^{-2/3} \sim 10^{-6}$ при $\mathcal{E}_o/F \sim 10^{-4}$ см $n \sim 10^{21}$ см$^{-3}$ от (6).

Мы учитывали $\mathcal{H}_1$ и $\mathcal{H}_2$ как возмущения, так как такой метод расчета наиболее нагляден, хотя формально и требует неоправданно более жестких ограничений на величину B. Но нетрудно видеть, что $\mathcal{H}_1$, содержащий $i\dfrac{\partial}{\partial k}$ в первой степени, может быть учтен точно, а $\mathcal{H}_2$ как возмущение. Точный учет $\mathcal{H}_1$ не приводит к сдвигу рассматриваемого уровня E_{N, K_y, K_z}. Расчет таким методом приводит к тем же результатам (5), (6). Матричные элементы $\mathcal{H}_2$ много меньше расстояния между уровнями $|F|a$ при $\mathcal{E}_o\left(\dfrac{eB}{\hbar c}\,a\,\dfrac{\mathcal{E}_o}{F}\right)^2 \ll |F|a$, что и предполагалось.

Рассмотрим теперь кубический кристалл с узкими валентной зоной и зоной проводимости $\mathcal{E}_o^{v,c} \ll E_g$ при $T \sim E_g$ в магнитном поле $\mathbf{B} \parallel 0Z$. Пусть за счет деформаций и других причин при $T = 0$, $B = 0$

$$\mathcal{H}^{v,c} = \mathcal{E}^{v,c}(k_x, k_y, k_z) + \Phi^{v,c}(x),\quad \Phi^c(x) - \Phi^v(x) = E_g(x)$$

и глубина модуляции $E_g(x)$ по x много больше $\mathcal{E}_o^{v,c}$. По параметру $\mathcal{E}_o/E_g$ выполняется приближение сильной связи, и

$$\mathcal{E}^{v,c}(k_x, k_y, k_z) = -\mathcal{E}_o^{v,c}\left[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a\right] + 0\left(\frac{\left(\mathcal{E}_o^{v,c}\right)^2}{E_g}\right).$$

Для простоты предположим, что остальные зоны отделены от рассматриваемых щелями много большими E_g. Рассматриваемые зоны могут быть и примесными – донорной и акцепторной, в этом случае примеси предполагаем упакованными в кубическую сверхрешетку с ребрами элементарной ячейки $a^v = a^c = a$, ориентированными по осям координат.

Метод расчета этой модели будет описан в более подробной статье, здесь приведем лишь результаты. При $T = 0$ система – диэлектрик, а при $T \sim E_g$ обе зоны частично заполнены, появляются объемные заряды и дополнительные электрические поля, с учетом которых гамильтониан при $T \sim E_g$, $B = 0$ принимает вид

$$\mathcal{H}^v = \mathcal{E}^v(k_x, k_y, k_z) - \frac{1}{2} E_g(x), \mathcal{H}^c = \mathcal{E}^c(k_x, k_y, k_z) + \frac{1}{2} E_g(x). \quad (7)$$

Магнитные свойства рассматриваемой системы зависят от x, и изменение термодинамического потенциала $\Omega = -T \sum_a \ln\left(1 + \exp\frac{\mu - E_a}{T}\right)$, связанное с включением локального поля B, приведенное к единичному объему, имеет вид: $\frac{1}{V} \delta\Omega = \frac{1}{V}\left(\delta\Omega^v + \delta\Omega^c\right)$

$$\frac{\delta\Omega^{v,c}}{V} \approx \frac{\mathcal{E}_o^{v,c}}{8a^3}\left(\frac{eB}{\hbar c} a \frac{\mathcal{E}_o^{v,c}}{F(x)}\right)^2 \frac{\mathcal{E}_o^{v,c}}{T}\left[1 + \exp\left(\frac{1}{2T} E_g(x)\right)\right]^{-1}\left[1 + \exp\left(-\frac{1}{2T} E_g(x)\right)\right]^{-1} = D^{v,c}B^2, \quad F(x) = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} E_g(x). \quad (8)$$

Результат (8) справедлив при выполнении условий $\left(\frac{\hbar c}{eB\sqrt{a}}\right)^{2/3} \gg \frac{\mathcal{E}_o}{|F|} \gg$ $\gg a$, $\frac{\mathcal{E}_o}{|F|} < l$, $\left|\frac{\partial^2 E_g}{\partial x^2}\right| \ll \frac{F^2}{\mathcal{E}_o}$, очевидно , нарушающихся вблизи экстремумов $E_g(x)$, в которых $F = \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x} E_g(x) = 0$. Однако эти области, где подход неприменим, могут занимать относительно незначительную часть объема кристалла. Учет спинов удваивает $D^{v,c}$ (8)$D_s^{v,c} =$ $= 2D^{v,c}$.

Соответствующая (8) магнитная восприимчивость $4\pi\chi = -8\pi(D_s^v + D_s^c) \times$ $\times [1 + 8\pi(D_s^v + D_s^c)]^{-1} \sim -0{,}9$ при $a = 10^{-7}$см, $\frac{\mathcal{E}_o}{F} = 2 \cdot 10^{-3}$ см, $\frac{\mathcal{E}_o}{T} =$ $= 0{,}1$, $T \sim \frac{E_g}{2}$, $T^\circ = 300$ K. К сходным результатам приводит и расчет модели с $\mathcal{E}_o^v \ll E_g$,$\mathcal{E}_o^c \gg E_g$, $a^v \gg a^c$, т.е. кристалла с примесной донорной зоной v и зоной проводимости c , макроскопически неоднородно.

Целью работы было доказательство принципиальной возможности существования близкого к идеальному диамагнетизма, не связанного с электрон-электронным взаимодействием. Полученный эффект не является низкотемпературным.

Возможно, диамагнетизм такого типа наблюдался в эксперименте [2].

Автор благодарит Л.В.Келдыша за обсуждение результатов и замечания.

Московский
государственный университет им. М.В.Ломоносова

Поступила в редакцию
17 ноября 1980 г.

Литература

[1] Л.Д.Ландау. Zs. Phys., **64**, 629, 1930.

[2] Н.Б.Брандт, С.В.Кувшинников, А.П.Русаков, М.В.Семенов. Письма в ЖЭТФ, **27**, 37, 1978.