УДК 537.311.33

ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

П. В. Ратников[1], А. П. Силин

В приближении хаотических фаз проведен аналитический расчет корреляционной энергии электронного газа в узкощелевых полупроводниках в магнитном поле. Полученные результаты позволяют рассчитать энергию основного состояния и определить концентрацию электронов, соответствующую минимуму энергии.

Газ ультрарелятивистских электронов в магнитном поле. В настоящей работе рассматривается холодный электронный газ ($T << E_F$) в узкощелевых полупроводниках в достаточно сильных магнитных полях таких, что расстояние между низшим и ближайшим вышележащим уровнями Ландау превосходит энергию Ферми, поэтому можно считать, что все носители тока находятся на низшем уровне Ландау.

Релятивистский электрон в магнитном поле H описывается уравнением Дирака [1, 2]

$$\left\{\alpha_1 u_\perp\left(p_1 - \frac{e}{c}Hy\right) + \alpha_2 u_\perp p_2 + \alpha_3 u_\parallel p_3 + \beta\Delta\right\}\Psi_\zeta = E\Psi_\zeta, \qquad (1)$$

где Ψ_ζ – собственные волновые функции с определенной проекцией спина $\zeta = \pm 1$ на ось, вдоль которой направлено магнитное поле (ось z); $\Delta = E_g/2$ – полуширина запрещенной зоны; $p_k = -i\dfrac{\partial}{\partial x_k}$ – операторы импульса, $\hbar = 1$;

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \ k = 1, 2, 3, \ \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

где σ_k – матрицы Паули, I – единичная матрица.

[1] Московский физико-технический институт (МФТИ).

Величина u – матричный элемент скорости для межзонных переходов (квазискорость света), которая в случае осевой симметрии кристалла является тензором [1, 2]

$$u_i^j = u_{\|} l_i l^j + u_{\perp}(\delta_i^j - l_i l^j),$$

где l^k – компоненты единичного вектора, направленного вдоль оси симметрии; $u_{\|}$ и $u_{\perp}$ – кейновские матричные элементы скорости вдоль этой оси и перпендикулярно ей соответственно. Ниже рассматривается случай анизотропии величины u.

Энергия электрона в магнитном поле имеет вид [3]:

$$E_{l\zeta}(p_z) = \sqrt{\Delta^2 + u_{\|}^2 p_z^2 + \frac{e}{c} H u_{\perp}^2 (2l + 1 - \zeta)}, \tag{2}$$

где l – номер уровня Ландау.

Все носители тока находятся на низшем уровне Ландау ($l = 0$, $\zeta = 1$), когда выполняется условие

$$u_{\|}^2 p_F^2 < 2\frac{e}{c} H u_{\perp}^2, \tag{3}$$

где импульс Ферми электронов в магнитном поле

$$p_F = 2\pi^2 L_H^2 n, \tag{4}$$

n – плотность электронов; $L_H = \sqrt{\dfrac{c}{eH}}$ – магнитная длина. Условие (3) можно записать в виде

$$\frac{H^3}{n^2} > 2\pi^4 \left(\frac{u_{\|}}{u_{\perp}}\right)^2 \left(\frac{c}{e}\right)^2. \tag{5}$$

В ультрарелятивистском пределе $\Delta << u_{\|} p_F$, которым мы в дальнейшем ограничимся, закон дисперсии линеен $E_{p_z} = u_{\|}|p_z|$ и $E_F = u_{\|} p_F$.

Мы рассматриваем электронный газ в сильном магнитном поле как систему независимых "нитей", направленных вдоль магнитного поля [4]. Двумерная плотность числа "нитей" в плоскости xy равна $(2\pi L_H^2)^{-1}$ [5]. В приближении, когда не учитываются переходы электронов между нитями, номер нити является хорошим квантовым числом и полный поляризационный оператор всей системы равен сумме одномерных поляризационных операторов.

Ограничения на концентрацию электронов n и магнитное поле H. Мы проводим расчет корреляционной энергии $E_{corr}(n)$ в приближении хаотических фаз (высокой плотности), которое применимо, когда энергия Ферми много больше энергии кулоновского взаимодействия [5–7]

$$E_F >> E_{x0} = \frac{\alpha_0^2}{4}\Delta, \tag{6}$$

где величина $\alpha_0 = \dfrac{e^2}{\varepsilon_0 u}$ – полупроводниковый аналог постоянной тонкой структуры (ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость; здесь и далее для простоты $u = u_{\|}$), которая для ряда полупроводников существенно превосходит обычную $\alpha = \dfrac{e^2}{c} = \dfrac{1}{137}$ $(1 > \alpha_0 >> \alpha)$ [8, 9].

Как будет показано ниже, интервал концентраций, в котором верно используемое приближение, становится менее широким по сравнению с интервалом концентраций, где верно нерелятивистское приближение сильной анизотропии $E_{x0} << E_F << \omega_p$, ω_p – плазменная частота. Это обусловлено характерной зависимостью поляризационного оператора от импульса и частоты в ультрарелятивистском пределе:

$$A_1 H << n << A_2 H^{5/4}, \tag{7}$$

или

$$B_1 n^{4/5} << H << B_2 n,$$

где $A_1 = \dfrac{\alpha_0^2}{2\pi^2}\dfrac{e\Delta}{cu}$ и $A_2 = \dfrac{\alpha_0^{1/4}}{\pi^{9/4}}\left(\dfrac{\Delta}{u}\right)^{1/2}\left(\dfrac{e}{c}\right)^{5/4}$, $B_1 = A_2^{-4/5}$, $B_2 = A_1^{-1}$. Отметим, что условие (5) при выполнении неравенств (7) удовлетворяется автоматически. В зависимости от типа полупроводника плотности и магнитные поля, для которых справедливы наши предположения и удовлетворяется условие (7), изменяются в широких пределах. Так, для InSb допустимыми значениями магнитного поля и концентрации электронов являются $5 \cdot 10^4$ Гс и 10^{15} см$^{-3}$, а для ZnTe требуются магнитные поля и концентрации не ниже 10^7 Гс и 10^{18} см$^{-3}$ (параметры некоторых узкощелевых полупроводников приведены в табл. 1).

Поляризуемость ультрарелятивистского электронного газа. При наложении достаточно сильного магнитного поля электронный газ можно считать одномерным. Как было показано в работах [5–7], основной вклад в корреляционную энергию вносит взаимодействие электронов, находящихся на разных нитях. В сильном магнитном поле нити “плотно упакованы”, поэтому электроны на разных нитях могут достаточно близко подходить друг к другу, что не запрещено принципом Паули (частицы, относящиеся к разным нитям, имеют разное квантовое число – номер нити).

Таблица 1

Численные значения параметров A_1 и A_2 для некоторых узкощелевых полупроводников

Кристалл	Δ, мэВ	m_e^*/m_0	ε_0	A_1, 10^{10} см$^{-3}$/Гс	A_2, 10^{10} см$^{-3}$/Гс$^{5/4}$
InSb	118	0.014	17	0.35	5.00
GaSb	406.5	0.047	15	1.93	9.49
GaAs	705	0.068	12.53	2.92	12.21
InAs	212.5	0.023	14.5	0.71	6.76
InP	708	0.082	14	2.82	12.75
AlSb	1160	0.09	11.5	3.02	14.72
ZnTe	1150.5	0.2	10	12.8	20.54

Корреляционная энергия электронного газа дается известной формулой [6]:

$$E_{corr}(n) = \frac{1}{2n}\int\limits_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}\int \frac{d^3\vec{k}d\omega}{(2\pi)^4}\left[\frac{4\pi\chi(\vec{k},i\omega;\lambda)}{1+4\pi\chi(\vec{k},i\omega;\lambda)} - 4\pi\chi^{(0)}(\vec{k},i\omega;\lambda)\right], \tag{8}$$

поляризуемость равна $4\pi\chi(\vec{k},i\omega) = -V(\vec{k})\Pi_{44}(\vec{k}_{\|},i\omega)$, где $V(\vec{k}) = \dfrac{4^2}{\varepsilon_0\vec{k}^2}$, $\bar{\Pi}_{44}(k_z,i\omega)$ – компонента полного поляризационного оператора, связанного с поляризационным оператором одной нити соотношением $\bar{\Pi}_{\mu\nu}(k_z,i\omega) = (2\pi L_H^2)^{-1}\prod_{\mu\nu}(k_z,i\omega)$. При выполнении условия (6) можно положить $\chi(\vec{k},i\omega;\lambda) \approx \chi^{(0)}(\vec{k},i\omega;\lambda)$, т.е. использовать выражение $\Pi_{44}^{(0)}(k_z,\omega)$ нулевого приближения поляризационного оператора, интересующая нас компонента которого равна [10–12]

$$\Pi_{44}^{(0)}(k_z,\omega) = 16\int \frac{dp}{2\pi}\frac{\theta(p_F-|p|)}{2E_p}\frac{(pk_z)^2 - \frac{E_p^2k_z^2}{u^2}}{\left(k_z^2-\frac{\omega^2}{u^2}\right)^2 - 4\left(pk_z - \frac{E_p\omega}{u^2}\right)^2}. \tag{9}$$

Мы не учитываем вакуумный поляризационный оператор, который дает перенормировку параметров закона дисперсии (2). Процедура перенормировки сводится к условию $\Pi_{44}^{(0)}(k_z,\omega)|_{n\to+0} = 0$.

Вещественная часть $\Pi_{44}^{(0)}(k_z, i\omega)$ при $q >> p_F$ и $\omega >> E_F$ равна

$$\mathrm{Re}\Pi_{44}^{(0)}(k_z, i\omega) = -\frac{8}{\pi}\frac{u\Delta^2 k_z^2}{(u^2k_z^2+\omega^2)^2} Arsh\left(\frac{up_F}{\Delta}\right). \tag{10}$$

Вычисление корреляционной энергии. Переходя в выражении для корреляционной энергии (8) к четырехмерным сферическим координатам и обезразмеривая, получим

$$E_{corr} = -\frac{uA}{32\pi^3 n}\int_0^\pi \sin^2\chi d\chi \int_0^1 d\xi \int_0^\infty d\eta \left[-\ln\left(1+\frac{\xi^2}{\eta(\xi^2\sin^2\chi+\cos^2\chi)^2}\right)+\frac{\xi^2}{\eta(\xi^2\sin^2\chi+\cos^2\chi)^2}\right],$$

где $A = \dfrac{16\alpha_0}{\pi}\dfrac{\Delta^2}{u^2L_H^2}Arsh\left(\dfrac{up_F}{\Delta}\right)$. На нижнем пределе по безразмерному четырехмерному импульсу η этот интеграл логарифмически расходится, поэтому он обрезается при $\eta_F = \dfrac{p_F^4}{A}$, то есть там, где нарушается используемое нами приближение (10). После преобразований получаем

$$E_{corr} = -\frac{\alpha_0}{4\pi^3}\frac{\Delta^2}{uL_H^2 n}Arsh\left(2\pi^2\frac{uL_H^2 n}{\Delta}\right)\cdot I\left(\frac{\alpha_0}{\pi^9}\frac{\Delta^2}{u^2L_H^{10}n^4}Arsh\left(2\pi^2\frac{uL_H^2n}{\Delta}\right)\right), \tag{11}$$

функция $I(x)$ определяется интегралом

$$I(x) = \int_0^{\sqrt{x}}\frac{d\xi}{\xi}\left(\left(1+\frac{1}{\xi^2}\right)\ln(1+\xi^2)-1\right) = \frac{1}{2}-\frac{1}{2}Log(1+x)-\frac{1+x}{2x}\ln(1+x),$$

где $Log(x) = \int_1^x dt\dfrac{\ln t}{1-t}$. Воспользовавшись соотношением $Log(x)+Log\left(\dfrac{1}{x}\right) = -\dfrac{1}{2}\ln^2 x$ и откидывая логарифмически малые члены, можно упростить выражение (11):

$$E_{corr} = -\frac{\alpha_0}{16\pi^3}\frac{\Delta^2}{uL_H^2 n}\ln\left(4\pi^2\frac{uL_H^2n}{\Delta}\right)\cdot\ln^2\left(\frac{\alpha_0}{\pi^9}\frac{\Delta^2}{u^2L_H^{10}n^4}\right), \tag{12}$$

причем аргумент логарифма довольно велик в области концентраций электронов и характерных магнитных полей $H = 10^4 - 10^6$ Гс.

Энергия основного состояния. Энергия основного состояния, приходящаяся на одну частицу, определена как сумма трех вкладов:

$$E(n) = E_0(n) + E_{exch}(n) + E_{corr}(n). \tag{13}$$

Первое слагаемое – средняя кинетическая энергия

$$E_0(n)=\frac{\Delta^2}{2up_F}\left[Arsh\left(\frac{up_F}{\Delta}\right)+\frac{up_F}{\Delta}\sqrt{1+\frac{u^2p_F^2}{\Delta^2}}\right]=\begin{cases}\frac{up_F}{2}, & up_F>>\Delta,\\ \Delta+\frac{u^2p_F^2}{6\Delta}, & up_F<<\Delta.\end{cases}\tag{14}$$

Второе слагаемое – обменная энергия – дается выражением

$$E_{exch}=-\frac{\alpha_0}{8\pi^3}\frac{\Delta^2}{uL_H^2n}J,\tag{15}$$

где $J=\int\limits_{-1}^{1}\int\limits_{-1}^{1}dxdy\frac{K_0(a|x-y|)}{\sqrt{x^2+\delta^2}\sqrt{y^2+\delta^2}}$, $a=L_Hp_F$, $\delta=\dfrac{\Delta}{up_F}$.

Численное значение параметра a мало в области плотностей (7), где применимо наше приближение. В случае $a<<1$ в интеграле J можно перейти к асимптотике функции Макдональда $K_0(a|x-y|)\approx\ln\frac{1}{a}$, тогда $J=4Arsh^2\left(\frac{1}{\delta}\right)$ и для двух предельных случаев получаем:

$$E_{exch}=-\frac{\alpha_0}{2\pi^3}\frac{\Delta^2}{uL_H^2n}\ln\frac{1}{a}\cdot\begin{cases}\ln^2\left(\frac{1}{\delta}\right), & up_F>>\Delta,\\ \frac{1}{\delta^2}, & up_F<<\Delta.\end{cases}\tag{16}$$

В нерелятивистском пределе (16) совпадает с результатом, полученным в работе [5].

Используя выражение для корреляционной энергии (12) и откидывая обменную энергию из-за ее малости, можно определить минимум энергии основного состояния электронного газа в узкощелевом полупроводнике в магнитном поле. Уравнение на концентрацию электронов, при которой достигается этот минимум, имеет следующий вид

$$\frac{\pi^3}{\alpha_0}\frac{uL_H^2}{\Delta}n-\ln^2(bn)=0,\tag{17}$$

где $b=\left(\dfrac{\pi^9}{\alpha_0}\right)^{1/4}\left(\dfrac{uL_H^5}{\Delta}\right)^{1/2}$, откуда с логарифмической точностью получаем

$$n_0=\frac{\alpha_0}{16\pi^3}\frac{e\Delta}{cu}H\ln^2\left(\left(\frac{\alpha_0}{\pi}\right)^3\frac{c\Delta^2}{u^2eH}\right).\tag{18}$$

Видно, что концентрация электронов (18) попадает в интервал (7) рассматриваемых нами концетраций электронов.

Заключение. Полученное нами аналитическое выражение для корреляционной энергии в сильном магнитном поле (12) позволяет рассчитать энергию ультрарелятивистского электронного газа в широком интервале концентраций электронов и магнитных полей, к которому относится и концентрация электронов (18), соответствующая минимуму полной энергии.

Работа выполнена при поддержке Фонда некоммерческих программ "Династия", Научной школы N: 4464.2006 г., Учебно-научного комплекса ФИАН и Целевой программы Президиума РАН поддержки молодых ученых.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Б. А. Волков, Б. Г. Идлис, М. Ш. Усманов. УФН **65**, 799 (1995).

[2] А. П. Силин, С. В. Шубенков. ФТТ **40**, 1345 (1998).

[3] А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика (Наука, М., 1969).

[4] S. T. Chui. Phys. Rev. **76**, 2433 (1973).

[5] Т. А. Онищенко. Труды ФИАН **123**, 7 (1980).

[6] L. V. Keldysh. Contemp. Phys. **27**(5), 395 (1986).

[7] Е. А. Андрюшин, В. С. Бабиченко, Л. В. Келдыш и др. Письма в ЖЭТФ **24**, 210 (1976).

[8] Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, С. В. Шубенков. Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 7-8, 22 (1995).

[9] А. П. Силин, С. В. Шубенков. ФТТ **42**, 25 (2000).

[10] Л. Е. Печеник, А. П. Силин. Краткие сообщения по физике ФИАН, No. 5-6, 72 (1996).

[11] Е. С. Фрадкин. Труды ФИАН **29**, 7 (1965).

[12] А. Е. Шабад. Труды ФИАН **192**, 5 (1988).

Поступила в редакцию 26 декабря 2006 г.