

ПСЕВДОЩЕЛЬ И ПЕРЕХОДЫ ДИЭЛЕКТРИК – МЕТАЛЛ В ПРИМЕСНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

А. И. Агафонов, Э. А. Манькин*

*Российский научный центр «Курчатовский институт»
123182, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 мая 2005 г.

Проведен расчет электронного спектра примесного полупроводника в модели Андерсона – Холстейна и его электропроводности в рамках формализма Кубо. На фазовой диаграмме найдены две характерные температуры, зависящие от уровня легирования. При первой температуре T_{PG} исчезает псевдощель, открывающаяся в спектрах одночастичных состояний при низких уровнях легирования и температурах. Причиной возникновения псевдощелевого диэлектрического состояния являются спиновые флуктуации в легированном соединении. При второй температуре $T_\lambda(x)$ затухают спиновые флуктуации, а легированное соединение переходит в состояние парамагнитного плохого металла. Найдены два различных перехода диэлектрик – металл, при которых происходит изменение температурной зависимости сопротивления от полупроводникового типа к металлическому. Первый переход диэлектрик \rightarrow плохой металл имеет место при температуре $T^*(x) \approx T_\lambda(x)$. Второй переход, псевдощелевой переход плохой металл \rightarrow диэлектрик в области низких температур, связан с псевдощелью и температурным изменением в ней плотности состояний. Показано, что оба перехода наблюдаются в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

PACS: 71.30.+h, 74.72.-h

1. ВВЕДЕНИЕ

Одно из наиболее обсуждаемых свойств высокотемпературных сверхпроводников связано с присутствием в нормальной фазе вблизи химического потенциала энергетической области с резко пониженной плотностью одночастичных состояний [1–4]. Такое состояние получило название псевдощелевого и наблюдается в тех купратах, для которых доступна недодопированная область фазовой диаграммы при температурах ниже характерной температуры T^* , которая зависит от уровня легирования. Псевдощель проявляет себя как особенность на экспериментально измеряемых характеристиках легированных купратов, таких как электропроводность, теплоемкость, магнитная восприимчивость. Так, при измерениях электропроводности соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ имеется характерная температура, при которой происходит переход от полупроводникового типа проводимости к металлическому, как показано на рис. 1, взятом из работы [5].

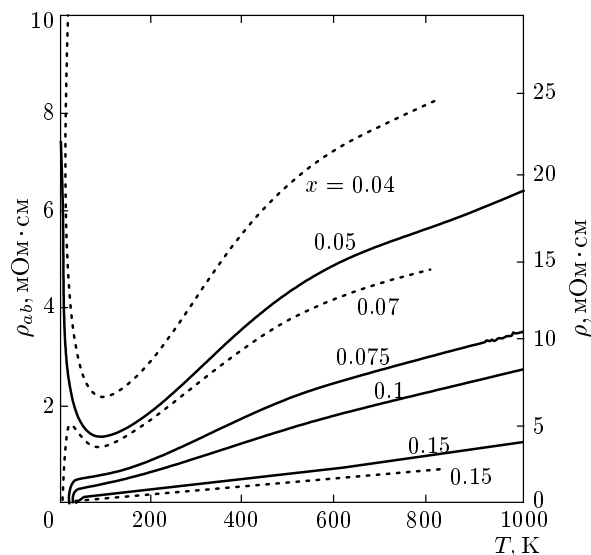


Рис. 1. Температурная зависимость сопротивления монокристаллов (пунктирные кривые, левая шкала) и поликристаллов (сплошные кривые, правая шкала) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ при различных уровнях легирования [5]

*E-mail: aai@issph.kiae.ru

Псевдощель наблюдается в ВТСП-материалах как при дырочном, так и при электронном легировании. Для последнего случая псевдощель была найдена недавно в нормальном состоянии соединений $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ и $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ при $T < T_c$, когда сверхпроводимость подавлялась магнитным полем [6].

В настоящее время нет общепринятой теории псевдощели. Анализ известных экспериментальных данных позволяет сделать вывод, что псевдощелевое и сверхпроводящее состояния сосуществуют и конкурируют, плавно переходя из одного в другое при изменении температуры, магнитного поля и концентрации носителей (см. работы [2, 7, 8] и ссылки в них). Известны подходы к ее описанию, в которых псевдощель рассматривается как предвестник сверхпроводимости. Это модели локальных пар, образующихся при $T > T_c$ и приобретающих фазовую когерентность при $T = T_c$ (см. работу [9] и ссылки в ней). В других подходах открытие псевдощели рассматривается как возникновение другого основного состояния, отделенного от сверхпроводящего некоторой квантовой критической точкой [4, 10], т. е. наряду со сверхпроводящим параметром порядка в псевдощелевом состоянии возникает по крайней мере еще один параметр упорядочения.

Предлагаемые теоретические подходы для описания нормального псевдощелевого и сверхпроводящего состояний должны согласовываться с экспериментальными данными по изменению электронной структуры и положению химического потенциала в зависимости от уровня легирования в ВТСП-материалах. Известные результаты, полученные для ряда сверхпроводящих легированных купратов, таких как $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ [11, 12], $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [13, 14] и $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{1-x}\text{Y}_x\text{Cu}_2\text{O}_8$ [15], ясно показывают, что при их легировании появляется плотность одночастичных состояний в области исходной запрещенной зоны нелегированных материалов, а химический потенциал находится в этих щелевых состояниях и почти не меняется при легировании [16, 17]. Таким образом, как псевдощель в нормальном состоянии в недодопированной области фазовой диаграммы, так и сверхпроводящая щель открываются в спектре одночастичных состояний, появляющихся при легировании в области исходной запрещенной зоны.

На основании того, что сверхпроводящее состояние сохраняется глубоко в диэлектрическом состоянии, сосуществует с антиферромагнетизмом купратов при малых уровнях допирования, но не проявляет себя лишь из-за разрушения дальнего порядка, недавно был предложен новый подход для

ВТСП-материалов [18]. Поскольку, по мнению автора работы [18], отсутствуют убедительные данные о возможности сверхпроводимости в моделях Хаббарда, вместо диагонализации конфликтующих гамильтонианов был использован подход БКШ для модели плоской квадратной решетки узлов, дополненный тем, что в волновую функцию основного состояния введен оператор проектирования, учитывающий кулоновское взаимодействие фермионов на узлах. В этой модели возникает плотность состояний в области щели Мотта–Хаббарда и отмечается [18–20], что химический потенциал не будет «перепрыгивать» через щель при легировании, как это происходит в моделях Хаббарда [17].

Однако в предложенной модели щелевая плотность состояний является конечной даже при отсутствии легирования [18]. В то же время экспериментальные исследования структурного пика плотности щелевых состояний с изменением уровня легирования показали, что площадь под ним пропорциональна уровню легирования (см. работу [14] и ссылки в ней).

Исходно La_2CuO_4 является антиферромагнетиком. При $x = 0.02$ магнитное упорядочение в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ исчезает, и уже в парамагнитной фазе при $x \geq 0.05$ имеют место переходы диэлектрик–сверхпроводник–металл в легированном соединении.

Целью настоящей работы является изучение псевдощелевого состояния в парамагнитной фазе примесного полупроводника, у которых при переходе от диэлектрической фазы к проводящей фазе возникает плотность одночастичных электронных состояний в области исходной запрещенной зоны. При этом химический потенциал находится в примесных зонах, возникающих в глубине этой энергетической щели, и его положение слабо меняется при легировании. Для описания примесного полупроводника используется модель Андерсона–Холстейна, в которой учитывается ансамбль примесных узлов, случайным образом распределенных в исходной решетке, и учтены электронные корреляции на примесных орбиталях. В результате расчета электронного спектра найдено псевдощелевое состояние в нормальной фазе примесного полупроводника, в образовании которого ключевая роль отводится спиновым флуктуациям в легированной системе. На основе формализма Кубо получено выражение для статической электропроводности. Обнаружены плавные переходы диэлектрик–металл при увеличении температуры и/или уровня легирования. Проводится сравнение полученных результатов с экспериментальными

данными для $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$.

2. МОДЕЛЬНЫЙ ГАМИЛЬТониАН

Химический состав купратных плоскостей не меняется при легировании как, например, в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Исходная зонная структура вблизи запрещенной зоны определяется в основном гибридизацией $3d$ -состояний меди и $2p$ -состояний кислорода. При введении примеси замещения в $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ионы La^{3+} в слоях LaO случайным образом замещаются ионами Sr^{2+} . Оба валентных электрона стронция идут на образование валентных связей, и, следовательно, можно ожидать возникновения однократно заполненной примесной орбитали [21–24]. Купратный слой CuO_2 в этом соединении находится между двумя промежуточными слоями состава $\text{La}_{1-x/2}\text{Sr}_{x/2}\text{O}$. Примесные орбитали прижаты к купратному слою, а их центры расположены вне CuO_2 -плоскости. Учитывая сильную анизотропию физических характеристик купратов, мы не будем рассматривать перенос заряда поперек слоев CuO_2 .

Обобщая одноузельную модель Андерсона–Халдайна [25] для примесного полупроводника с конечной концентрацией примесных атомов, случайным образом распределенных в исходной кристаллической решетке, и учитывая электрон-фононное взаимодействие холстейновского (локальная мода) или фрелиховского типа на примесных узлах, гамильтониан представленной модели можем записать в виде [26]

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{j, \sigma} \varepsilon_0 n_{j\sigma} + \sum_j U n_{j\sigma} n_{j, -\sigma} + \sum_{j, \mathbf{k}, \sigma} \{V_{\mathbf{k}j} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{j\sigma} + \text{H.c.}\} + \sum_{j, \sigma, \kappa} \hbar \Omega_{\kappa} \xi_{j\kappa} n_{j\sigma} \phi_{\kappa} + \sum_{\kappa} \hbar \Omega_{\kappa} \left(b_{\kappa}^+ b_{\kappa} + \frac{1}{2} \right). \quad (1)$$

Здесь оператор числа частиц $n_{\mathbf{k}\sigma} = a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma}$ относится к исходной валентной зоне полупроводника с законом дисперсии $\varepsilon_{\mathbf{k}}$; \mathbf{k} — волновой вектор; $\sigma = \uparrow, \downarrow$ — спиновый индекс; оператор числа частиц $n_{j\sigma} = a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}$ относится к ансамблю узлов, случайным образом распределенных в исходной решетке полупроводника; ε_0 — затравочная энергия электронного локализованного состояния на узле; j — номер узла; U — внутриузельная электронная корре-

ляционная энергия; $V_{\mathbf{k}j}$ — матричный элемент гибридизации,

$$V_{\mathbf{k}j} = V_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j),$$

\mathbf{R}_j — радиус-вектор j -го примесного центра; величина $\xi_{j\kappa}$ представляет электрон-фононное взаимодействие; Ω_{κ} — энергия фононов; b_{κ}^+ (b_{κ}) — оператор рождения (уничтожения) фонона и $\phi_{\kappa} = b_{\kappa} + b_{\kappa}^+$. В модели Фрелиха индекс « κ » следует заменить на \mathbf{q} — волновой вектор фонона, в модели холстейновской локальной моды $\kappa = j$.

В гамильтониане (1) используется однозонное приближение для полупроводника. Это вызвано тем, что численный анализ представленных ниже аналитических решений замкнутых систем уравнений для функций Грина удалось провести только в этом приближении, хотя эти полученные решения можно обобщить на случай многих зон.

Собственные состояния гамильтониана (1) зависят от исходного узельного заполнения

$$2A = \langle j | n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow} | j \rangle.$$

Мы рассматриваем случай одного электрона на примесную орбиталь, $2A = 1$. Полное число примесных узлов N_{im} представим в виде $N_{im} = xN_t$, где N_t — полное число состояний в затравочной зоне полупроводника, а x будем рассматривать как уровень легирования.

Резонансная теория глубоких локализованных состояний в кристаллических полупроводниках основана на рассмотрении гамильтониана Андерсона–Халдайна с одним примесным атомом [25, 27]. Этот гамильтониан получается из гамильтониана (1), если в последнем опустить члены, связанные с фононной подсистемой, и считать, что индекс « j » принимает только одно значение. Глубокие уровни в запрещенной зоне в такой модели возникают не в результате отщепления локализованного состояния от зонного континуума, а в результате перенормировки собственного уровня (резонанса), вносимого примесью в спектр матрицы [27].

Учет конечной концентрации примесных атомов приводит к качественно различным результатам для энергетического спектра электронов в примесном полупроводнике [28]. В этом случае гибридизация вызывает последовательность одночастичных переходов между примесной орбиталью и зонным состоянием. В результате в области исходной запрещенной зоны образуются два типа узких примесных зон с большой плотностью состояний.

В результате одночастичных переходов по примесному ансамблю (исходно зонное \mathbf{k} -состояние \rightarrow

→ примесный узел $j \rightarrow$ исходно зонное \mathbf{k}_1 -состояние и т. д.) часть зонных состояний отщепляется в область запрещенной зоны, формируя первый тип примесных зон [28]. Число состояний в этих зонах точно равно уменьшению числа зонных состояний. Эти щелевые состояния, характеризуемые законом дисперсии, можно назвать распространенными состояниями.

Гибридизация также приводит к переходам примесный узел $j \rightarrow$ исходно зонное \mathbf{k} -состояние → примесный узел $j_1 \rightarrow \mathbf{k}_1$ -состояние → примесный узел j_2 и т. д. Оказалось, что диагональная по j функция Грина имеет простой полюс, который лежит внутри щелевой зоны распространенных состояний, возникшей в исходной запрещенной зоне полупроводника (см. рис. 5 в работе [28]). Этот результат был получен для немагнитного решения в согласованном приближении Хартри–Фока, в рамках которого внутриузельные корреляции сводятся к перенормировке затравочной энергии локализованного состояния на узле, $\varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_0 + \langle n_{j\sigma} \rangle$, в первом порядке для собственно-энергетической части Σ_{jj} :

$$\Sigma_{jj}^{(1)} = \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^2}{G^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega) - xN_t|V_{\mathbf{k}l}|^2 G^{(0)}(l, l; \omega)},$$

где ($\delta \rightarrow +0$)

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}} + i\delta)^{-1},$$

$$G^{(0)}(l, l; \omega) = (\omega - \varepsilon_0 + i\delta)^{-1}.$$

Используя технику конфигурационного усреднения по положениям $\{\mathbf{R}_j\}$ примесных атомов [29], можно найти поправку во втором порядке к собственно-энергетической части:

$$\Sigma_{jj}^{(2)} = xN_t G^{(0)}(l, l; \omega) \times \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^4}{a_{\mathbf{k}}^2} \left[\frac{1}{1-c} \int_0^{\infty} \frac{dt e^{-t}}{e^{-zt} + c/(1-c)} - 1 \right],$$

где

$$z = G^{(0)}(l, l; \omega) \Sigma_{jj}^{(1)}(\omega),$$

$$a_{\mathbf{k}} = G^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega) - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2 G^{(0)}(l, l; \omega)$$

и $c = xN_t/N_s$, N_s — концентрация решеточных узлов для примеси.

Можно показать, что при учете второй поправки для Σ_{jj} сохраняется простой полюс у диагональной по j функции Грина, который лежит в примесной зоне распространенных состояний. Этот второй тип примесных зон будем называть локальными состояниями.

3. СИСТЕМА ФУНКЦИЙ ГРИНА ДЛЯ НОРМАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ

Рассмотрение проводим в представлении термодинамических переменных, в котором задано полное число фермионов в легированной системе. Это позволяет определить химический потенциал μ . Для гамильтониана (1) замкнутая система уравнений для температурных функций Грина [30] была получена в работе [26] с использованием двух приближений: в уравнениях движения для функций Грина $g_{\sigma\sigma_1}(j, \nu; \tau)$ с первым параметром j для появляющихся двухчастичных функций Грина использовались приближение среднего поля и затравочная электрон-фононная вершина в собственно-энергетических частях.

В результате для парамагнитного нормального состояния система уравнений для распространенных состояний приводится к виду

$$g_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1; \omega_n) = g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) \times \left[\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_1} \delta_{\sigma\sigma_1} + \sum_j V_{\mathbf{k}j} g_{\sigma\sigma_1}(j, \mathbf{k}_1; \omega_n) \right], \quad (2)$$

$$g_{\sigma\sigma_1}(j, \mathbf{k}; \omega_n) = g^{(0)}(l, l; \omega_n) \times \left\{ \sum_{\mathbf{k}_1} V_{j\mathbf{k}_1} g_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}; \omega_n) - [\lambda U - \Sigma_{\lambda}(\omega_n)] g_{-\sigma\sigma_1}(j, \mathbf{k}; \omega_n) \right\}. \quad (3)$$

Аналогично для локальных состояний в нормальной фазе получаем

$$g_{\sigma\sigma_1}(j, j_1; \omega_n) = g^{(0)}(l, l) \times \left\{ \delta_{jj_1} \delta_{\sigma\sigma_1} + \sum_{\mathbf{k}} V_{j\mathbf{k}} g_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{k}, j_1) - [\lambda U - \Sigma_{\lambda}(\omega_n)] g_{-\sigma\sigma_1}(j, j_1) \right\}, \quad (4)$$

$$g_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{k}, j; \omega_n) = g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) \sum_{j_1} V_{\mathbf{k}j_1} g_{\sigma\sigma_1}(j_1, j; \omega_n). \quad (5)$$

В уравнениях (2)–(5) использованы обозначения

$$\omega_n = (2n+1)\pi T, \quad g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}})^{-1}, \quad (6)$$

$$g^{(0)}(l, l; \omega_n) = [i\omega_n - \varepsilon_0 - UA - \Sigma(\omega_n)]^{-1}, \quad (7)$$

собственно-энергетические части

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega_n) = \\ = -T(\xi\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1} d^0(\omega_n - \omega_{n_1}) g_{\sigma\sigma}(j, j; \omega_{n_1}), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_\lambda(\omega_n) = \\ = -T(\xi\hbar\Omega)^2 \sum_{n_1} d^0(\omega_n - \omega_{n_1}) g_{-\sigma\sigma}(j, j; \omega_{n_1}) \end{aligned} \quad (9)$$

и фононная функция Грина

$$d^0(\omega_m = 2m\pi T) = (i\omega_m - \Omega)^{-1} - (i\omega_m + \Omega)^{-1}. \quad (10)$$

Полагаем, что примесные атомы в кристаллической решетке занимают физически-эквивалентные узлы, в силу чего опускаем индекс « j » у величин ξ и Ω .

Решения систем уравнений (2), (3) и (4), (5) с учетом определений (6)–(10) самосогласованно зависят от трех параметров. Первый из них есть узельное заполнение

$$A_\sigma = g_{\sigma\sigma}(j, j; \tau \rightarrow -0). \quad (11)$$

В общем случае $A_\sigma \neq A_{-\sigma}$ и решение этой системы будет соответствовать магнитной фазе легированного соединения. В этой фазе могут появиться локальный и зонный магнитные моменты из-за различия в заполнении электронных состояний в двух спиновых подпространствах [31]. Для немагнитного состояния имеем $A_\sigma = A_{-\sigma} = A$, а узельное заполнение приводится к виду [26]

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{loc}(\omega) d\omega}{\exp[(\omega - \mu)/T] + 1}, \quad (12)$$

где $\rho_{loc}(\omega)$ — спектральная плотность локального состояния на узле,

$$\rho_{loc}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g_{\sigma\sigma}(j, j; \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0}, \quad (13)$$

которая имеет нормировку

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{loc}(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (14)$$

Используя выражение (10) и спектральное представление [30] для $g_{\sigma\sigma}(j, j; \omega_n)$, аналитически продолженную собственно-энергетическую часть (8) с

дискретного множества точек на верхнюю полуплоскость ω можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Sigma(\omega; A, \lambda, \mu) = (\xi\Omega)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{loc}(x) dx \times \\ \times \left[\frac{n(\mu - x) + N}{\omega - x - \Omega + i\gamma} + \frac{n(x - \mu) + N}{\omega - x + \Omega + i\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $N = 1/[\exp(\Omega/T) - 1]$, а положительная константа γ в расчетах полагалась конечной, так что $\gamma \ll \Omega$.

Второй параметр есть спин-флуктуационный параметр λ ,

$$\lambda = g_{\downarrow\uparrow}(j, j; \tau \rightarrow 0), \quad (16)$$

связанный с недиагональностью функций Грина по спиновой переменной. Он приводится к виду [26]

$$\lambda = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{loc}^{sf}(\omega) d\omega}{\exp[(\omega - \mu)/T] + 1}, \quad (17)$$

где $\rho_{loc}^{sf}(\omega)$ — спектральная плотность спиновых флуктуаций на узле,

$$\rho_{loc}^{sf}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} g_{-\sigma\sigma}(j, j; \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0}, \quad (18)$$

которая имеет свойство

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho_{loc}^{sf}(\varepsilon) d\varepsilon = 0. \quad (19)$$

Собственно-энергетическую часть (9) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Sigma_\lambda(\omega; A, \lambda, \mu) = (\xi\Omega)^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{loc}^{sf}(x) dx \times \\ \times \left[\frac{n(\mu - x) + N}{\omega - x - \Omega + i\gamma} + \frac{n(x - \mu) + N}{\omega - x + \Omega + i\gamma} \right]. \end{aligned} \quad (20)$$

Из условия сохранения полного числа фермионов получаем уравнение для нахождения третьего параметра — химического потенциала μ в легированном соединении:

$$\frac{1+x}{2} N_t = x N_t A + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_{ext}(\omega) d\omega}{\exp[(\omega - \mu)/T] + 1}, \quad (21)$$

где $\rho_{ext}(\omega)$ — спектральная плотность распространенных состояний в примесном полупроводнике:

$$\rho_{ext}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\mathbf{k}} g_{\sigma\sigma}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i0}. \quad (22)$$

С использованием техники конфигурационного усреднения [29] по положениям $\{\mathbf{R}_j\}$ примесных атомов решение этой системы уравнений для температурных функций Грина было найдено в работе [26]. Для локальных узельных состояний оно имеет вид

$$g_{\sigma\sigma_1}(j, j; \omega_n) = \frac{1}{2} \times \\ \times [g_{loc}(\omega_n; A - \lambda) + (-1)^{\sigma - \sigma_1} g_{loc}(\omega_n; A + \lambda)], \quad (23)$$

где

$$g_{loc}^{-1}(\omega_n; A \pm \lambda) = h(\omega_n; A \pm \lambda) - \\ - \sum_{\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{k}l}^2}{g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}) - xN_t V_{\mathbf{k}l}^2 h^{-1}(\omega_n; A \pm \lambda)}, \quad (24)$$

$$h(\omega_n; A \pm \lambda) = i\omega_n - \varepsilon_0 - U(A \pm \lambda) - \\ - \Sigma(\omega_n) \pm \Sigma_\lambda(\omega_n). \quad (25)$$

Для распространенных состояний было получено

$$g_{\sigma\sigma_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) = \frac{1}{2} [g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_n; A - \lambda) + \\ + (-1)^{\sigma - \sigma_1} g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_n; A + \lambda)], \quad (26)$$

где

$$g_{ext}^{-1}(\mathbf{k}; \omega_n; A \pm \lambda) = g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n) - \\ - \frac{xN_t V_{\mathbf{k}l}^2}{h(\omega_n; A \pm \lambda) - \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}l}^2 g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n)}. \quad (27)$$

4. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

В запрещенной зоне легированного полупроводника сосуществуют зоны локальных и распространенных состояний. Поэтому перенос заряда в примесных зонах будет осуществляться по нескольким каналам, связанным структурой примесных зон. Для вычисления электропроводности используем теорию линейного отклика Кубо [32]. Вещественная часть линейного отклика определяет проводимость среды. Для статической проводимости имеем

$$\sigma(\omega) = - \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \frac{V}{\hbar\omega_0} \text{Im } G^R(\omega_0). \quad (28)$$

где V — объем полупроводника, ω_0 — частота однородного электрического поля, $G^R(\omega)$ — фурье-образ запаздывающей функции Грина,

$$G^R(t - t') = -i\theta(t - t') \text{Sp } \rho_0 [j_x(t), j_x(t')], \quad (29)$$

ρ_0 — равновесная матрица плотности,

$$\rho^{(0)} = \exp\left(\frac{\Omega_{th} - H + \mu N}{T}\right), \quad (30)$$

Ω_{th} — термодинамический потенциал, H — гамильтониан (1),

$$j_x(t) = \exp\left[i\frac{(H - \mu N)t}{\hbar}\right] \times \\ \times j_x \exp\left[-i\frac{(H - \mu N)t}{\hbar}\right], \quad (31)$$

$\hat{\mathbf{j}}$ — оператор плотности тока в шредингеровском представлении:

$$\hat{\mathbf{j}} = \frac{e\hbar}{mV} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{e\hbar a_0^{3/2}(\mathbf{k})}{mV^{3/2}} \times \\ \times \sum_{j, \mathbf{k}, \sigma} \mathbf{k} [a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{j\sigma} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) + \text{H.c.}], \quad (32)$$

m — масса электрона, a_0 — характерная длина, определяемая уравнением

$$\mathbf{k} a_0^{3/2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}} \phi_{\mathbf{R}_j=0}(\mathbf{r}),$$

$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ — волновая функция зонного состояния полупроводника, $\phi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r})$ — волновая функция на примесном узле j . Характерная длина имеет порядок a_0 радиуса локализации примесного состояния a_{eff} , определяемого по асимптотике

$$\phi_j(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j| \rightarrow \infty) \propto \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|/a_{eff}).$$

Используя спектральное представление [30], для мнимой части фурье-компоненты G^R получаем

$$\text{Im } G^R(\omega) = -\pi \left(1 - e^{-\omega/T}\right) \times \\ \times \sum_{n, m} \exp[(\Omega_{th} - E_n + \mu N_n)/T] |\langle n | j_x | m \rangle|^2 \times \\ \times \delta(\omega + \omega_{nm}), \quad (33)$$

где $\omega_{nm} = E_n - E_m - \mu(N_n - N_m)$.

Функция (33) является нечетной:

$$\text{Im } G^R(-\omega) = -\text{Im } G^R(\omega), \quad \text{Im } G^R(\omega = 0) = 0.$$

Поэтому для статической проводимости формула (28) приводится к виду, удобному для расчетов:

$$\sigma(\omega) = -\frac{V}{\hbar} \frac{d}{d\omega} \text{Im } G^R(\omega)|_{\omega=0}. \quad (34)$$

Известно, что диаграммная техника развита для температурных функций Грина. Введем функцию Грина

$$g(\tau) = -\text{Sp} \left\{ \exp[(\Omega_{th} - H + \mu N)/T] \times \right. \\ \left. \times \exp[(H - \mu N)\tau] j_x \exp[-(H - \mu N)\tau] j_x \right\}, \\ \tau > 0, \\ g(\tau) = -\text{Sp} \left\{ \exp[(\Omega_{th} - H + \mu N)/T] \times \right. \\ \left. \times \exp[-(H - \mu N)\tau] j_x \exp[(H - \mu N)\tau] j_x \right\}, \\ \tau < 0. \quad (35)$$

Разлагая функцию (35) в ряд Фурье по дискретным частотам $\omega_k = 2k\pi T$, получаем

$$\text{Im} g(i\omega_k \rightarrow \omega + i\delta) = \text{Im} G^R(\omega)$$

и, следовательно, выражение (28) можно привести к виду

$$\sigma(\omega) = -\hbar V \frac{d}{d\omega} \text{Im} g(i\omega_k \rightarrow \omega + i\delta)|_{\omega=0}. \quad (36)$$

Выражение (36) является основным для нахождения статической проводимости. Но сначала мы найдем $g(\omega_k)$. При этом достаточно определить функцию Грина только при $\tau > 0$. Используя выражение (32) для тока и (...) для обозначения усреднения по Гиббсу, из уравнения (35) получаем

$$g(\tau > 0) = -\xi_1^2 \sum k_{1x} k_{2x} G_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j) G_{\mathbf{k}_1 j \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j) G_{j \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j) G_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 j}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) G_{\mathbf{k}_1 j_1 \mathbf{k}_2 j_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) G_{j_1 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 j_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j) G_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 j \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) G_{\mathbf{k}_1 j_1 j_2 \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) - \\ -\xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) \times \\ \times G_{j_1 \mathbf{k}_1 j_2 \mathbf{k}_2}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau), \quad (37)$$

где

$$G_{\alpha\beta\gamma\mu}^{\sigma_1 \sigma_1 \sigma_2 \sigma_2}(\tau) = \langle \tilde{a}_{\alpha\sigma_1}(\tau) \tilde{a}_{\beta\sigma_1}(\tau) \tilde{a}_{\gamma\sigma_2}(0) \tilde{a}_{\mu\sigma_2}(0) \rangle,$$

суммирования проводятся по всем верхним и нижним индексам G -функций и

$$\xi_1 = \frac{e\hbar}{mV}, \quad \xi_2 = \frac{e\hbar d_0^{3/2}}{mV^{3/2}}.$$

Для дальнейших преобразований выражения (37) используем приближение среднего поля и учитываем только связанные диаграммы (несвязанные диаграммы, очевидно, не дадут вклада в проводимость). После перехода к фурье-компоненте получим

$$g(\omega_n = 2n\pi T) = \xi_1^2 \sum k_{1x} k_{2x} B_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j) B_{j \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j) B_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 j}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j) B_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 j \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) \times \\ \times B_{j_1 \mathbf{k}_2 j_2 \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} + i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) \times \\ \times B_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 j_2 j_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_1 \xi_2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j) B_{\mathbf{k}_1 j \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) \times \\ \times B_{j_1 j_2 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) + \\ + \xi_2^2 \sum k_{1x} k_{2x} \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_{j_1} - i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_{j_2}) \times \\ \times B_{\mathbf{k}_1 j_2 \mathbf{k}_2 j_1}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n). \quad (38)$$

Здесь

$$B_{\alpha\beta\gamma\mu}^{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_2 \sigma_1}(\omega_n) = \\ = T \sum_{\omega_m} g_{\sigma_1 \sigma_2}(\alpha, \beta; \omega_n + \omega_m) g_{\sigma_2 \sigma_1}(\gamma, \mu; \omega_m)$$

и $\omega_m = (2m + 1)\pi T$.

Каждое слагаемое в правой части уравнения (38) преобразуется при использовании систем уравнений (2), (3) и (4), (5) так, что исключаются недиагональные функции Грина по j и \mathbf{k} . Так, например, для преобразования второго члена в (38) учтем (3). Поскольку $V_{\mathbf{k}j} = V_{\mathbf{k}l} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j)$, получим

$$\sum_j \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j) g_{\sigma_1 \sigma_2}(j, \mathbf{k}_2; \omega_n + \omega_m) = \\ = \frac{1}{V_{\mathbf{k}_1 l}} \left[g^{(0)-1}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1; \omega_n + \omega_m) \times \right. \\ \left. \times g_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \omega_n + \omega_m) - \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \right]. \quad (39)$$

Подставляя выражение (39) во второй член в правой

части уравнения (38) и интегрируя по углам волновых векторов $\mathbf{k}_{1,2}$, это слагаемое приводим к виду

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \xi_1 \xi_2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{V_{\mathbf{k}l}} T \sum_m g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) \times \\ & \times \left[g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) + \right. \\ & \left. + g_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) g_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) \right] - \\ & - \frac{2}{3} \xi_1 \xi_2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{V_{\mathbf{k}l}} T \sum_m g_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m). \quad (40) \end{aligned}$$

Последний член в этом выражении можно опустить, поскольку он не дает вклада в проводимость. Используя найденное выражение (26) для функции Грина, оставшийся член в (40) можно выразить через функции g_{ext} . Аналогичным образом преобразуются первый, четвертый и пятый члены в правой части уравнения (38).

Теперь рассмотрим третий член в правой части уравнения (38). Умножим уравнение (5) на $\exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_j)$ и возьмем сумму по j :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V_{\mathbf{k}_1}} \sum_j V_{j\mathbf{k}_1} g_{\sigma_2\sigma_1}(\mathbf{k}_2, j; \omega_m) = N_{im} V V_{\mathbf{k}_1} \times \\ & \times g^{(0)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1; \omega_m) g_{\sigma_2\sigma_1}(j, j; \omega_m) \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) + \\ & + \frac{1}{V_{\mathbf{k}_1}} \sum_{j, j_1 \neq j} V_{j\mathbf{k}_1} g^{(0)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_2; \omega_m) V_{\mathbf{k}_2 j_1} \times \\ & \times g_{\sigma_2\sigma_1}(j_1, j; \omega_m). \quad (41) \end{aligned}$$

Последним членом в выражении (41) пренебрегаем, поскольку он пропорционален $x^2 \ll 1$. Используя (41) и найденные функции (23) и (26), третий член в правой части уравнения (38) можно выразить через g_{ext} и g_{loc} . Аналогичным образом преобразуем члены с шестого по девятый в правой части уравнения (38).

В результате выражение (38) сводится к виду

$$\begin{aligned} g(\omega_n) = & \frac{1}{3} \xi_1^2 \sum_{\mathbf{k}} k^2 T \sum_m F(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) + \\ & + \frac{1}{3} \xi_1 \xi_2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{V_{\mathbf{k}l}} T \times \\ & \times \sum_m \left[g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) + g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) \right] \times \\ & \times F(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) + \\ & + \frac{1}{3} \xi_2^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{k^2}{V_{\mathbf{k}l}^2} T \sum_m g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times g^{(0)-1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) F(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) + \\ & + \frac{1}{3} \xi_1 \xi_2 N_{im} V \sum_{\mathbf{k}} k^2 V_{\mathbf{k}l} T \times \\ & \times \sum_m \left[g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) G(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) + \right. \\ & \left. + g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) H(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) \right] + \\ & + \frac{1}{3} \xi_2^2 N_{im}^2 V^2 \sum_{\mathbf{k}} k^2 V_{\mathbf{k}l}^2 T \sum_m g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_m) \times \\ & \times g^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \omega_n + \omega_m) D(\omega_n; \omega_m; A; \lambda) + \\ & + \frac{1}{3} \xi_2^2 N_{im} V \sum_{\mathbf{k}} k^2 T \times \\ & \times \sum_m \left[H(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) + G(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) \right]. \quad (42) \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) = & \\ = \sum_{p=1,2} g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_n + \omega_m; A + (-1)^p \lambda) \times & \\ \times g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_m; A + (-1)^p \lambda), \quad (43) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) = & \\ = \sum_{p=1,2} g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_n + \omega_m; A + (-1)^p \lambda) \times & \\ \times g_{loc}(\omega_m; A + (-1)^p \lambda), \quad (44) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}; \omega_n; \omega_m; A; \lambda) = & \\ = \sum_{p=1,2} g_{loc}(\omega_n + \omega_m; A + (-1)^p \lambda) \times & \\ \times g_{ext}(\mathbf{k}; \omega_m; A + (-1)^p \lambda), \quad (45) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D(\omega_n; \omega_m; A; \lambda) = & \\ = \sum_{p=1,2} g_{loc}(\omega_n + \omega_m; A + (-1)^p \lambda) \times & \\ \times g_{loc}(\omega_m; A + (-1)^p \lambda). \quad (46) \end{aligned}$$

Суммы по m в выражении (42) вычислялись с использованием спектрального разложения температурных функций Грина. После этого, подставляя полученные значения в уравнение (36), окончательно получаем выражение для статической проводимости:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \sigma_m E_*^2 \int_{-D_b}^{D_b} d\varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tilde{k}^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \times \\
&\times \sum_{p=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{df(\omega - \mu)}{d\omega} \right) \times \\
&\times \left(1 + \kappa \frac{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{V_{\mathbf{k}}} \right)^2 \rho_{ext}^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega; A + (-1)^p \lambda) + \\
&+ 2\sigma_m x E_*^2 \kappa^2 \int_{-D_b}^{D_b} d\varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tilde{k}^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \\
&+ \sum_{p=1,2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left(-\frac{df(\omega - \mu)}{d\omega} \right) \times \\
&\times \rho_{ext}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega; A + (-1)^p \lambda) \rho_{loc}(\omega; A + (-1)^p \lambda) + \\
&+ 2\sigma_m x E_*^2 \kappa \int_{-D_b}^{D_b} d\varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tilde{k}^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}) V_{\mathbf{k}} \times \\
&\times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho_{loc}(\omega; A \pm \lambda)}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \times \\
&\times \left[\rho_{ext}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \omega; A \pm \lambda) \left(-\frac{df(\omega)}{d\omega} \right) - \right. \\
&- \left. \rho_{ext}(\varepsilon_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}}; A \pm \lambda) \left(-\frac{df(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{d\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \right] + \\
&+ \sigma_m x^2 E_*^2 \kappa^2 \int_{-D_b}^{D_b} d\varepsilon_{\mathbf{k}} \tilde{\rho}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \tilde{k}^2(\varepsilon_{\mathbf{k}}) V_{\mathbf{k}}^2 \times \\
&\times \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho_{loc}^2(\omega; A \pm \lambda)}{(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2} \left(-\frac{df(\omega)}{d\omega} \right) - \right. \\
&- \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\rho_{loc}(\omega; A \pm \lambda)}{\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \times \\
&\times \left[2 \frac{d\rho_{loc}(\varepsilon_{\mathbf{k}}; A \pm \lambda)}{d\varepsilon_{\mathbf{k}}} \left(-\frac{df(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{d\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) - \right. \\
&- \left. \left. \rho_{loc}(\varepsilon_{\mathbf{k}}; A \pm \lambda) \left(\frac{d^2 f(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{d\varepsilon_{\mathbf{k}}^2} \right) \right] \right\}. \quad (47)
\end{aligned}$$

Здесь введены следующие обозначения: $f((\omega - \mu)/T)$ — распределение Ферми, $\kappa = \sqrt{a_0^3 N_t}$ — безразмерная величина, $\tilde{\rho}^0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \rho^0(\varepsilon_{\mathbf{k}})/N_t$ — плотность зонных состояний, нормированная на одно состояние, N_t — концентрация исходных зонных состояний на спин, $\tilde{k}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = k(\varepsilon_{\mathbf{k}})/k_{max}$ — безразмерная величина, k_{max} — максимальный волновой вектор зонных электронов и

$$\sigma_m E_*^2 = \frac{\pi}{3} \frac{e^2 \hbar^3 N_t k_{max}^2}{m^2}.$$

В вычислениях мы использовали модель симметричной валентной зоны исходного полупроводника с плотностью состояний на спин

$$\rho^{(0)}(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{N_t}{\pi D_b^2} \sqrt{D_b^2 - \varepsilon^2}, & |\varepsilon| \leq D_b, \\ 0, & |\varepsilon| > D_b. \end{cases} \quad (48)$$

Здесь $2D_b$ — ширина валентной зоны, N_t — полное число состояний в зоне.

Полагая, что закон дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ зависит только от модуля волнового вектора, и используя выражение (48), можно получить зависимость $k(\varepsilon)$, необходимую для вычисления электропроводности:

$$k(\varepsilon) = k_{max} \left[\frac{\varepsilon}{D_b} \sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{D_b^2}} + \frac{1}{\pi} \arctg \left(\frac{\varepsilon}{D_b^2 - \varepsilon^2} \right) + \frac{1}{2} \right]^{1/d}, \quad (49)$$

где $d = 2, 3$ и $k_{max} = (3\pi^2 N_t)^{1/3}$ в трехмерном случае, $k_{max} = (4\pi N_t)^{1/2}$ в двумерном случае.

Ниже мы представим результаты расчета проводимости для двумерного случая зависимости $k(\varepsilon)$. Для трехмерного случая результаты принципиально не отличаются. Будут представлены плотности состояний, нормированные на концентрацию атомов примеси. Так, распространенные состояния будут характеризоваться плотностью $\rho_{ext}(\omega)/xN_t$ на спин и на примесный атом. Для того чтобы показать влияние легирования на плотность распространенных состояний в валентной зоне, в этой области спектра введем изменение плотности состояний на спин и на примесный атом:

$$\Delta \rho_{ext}^f(\omega) = \frac{1}{xN_t} \left[\rho_{ext}^f(\omega) - \rho^{(0)}(\omega) \right].$$

В полученных выражениях для функции Грина мы используем замену

$$V_{\mathbf{k}l} = V_k / \sqrt{N_t},$$

где V_k имеет размерность энергии. При вычислениях полагалось, что величина V_k не зависит от \mathbf{k} .

Таким образом, шесть констант $D_b, \varepsilon_0, V_k, U, \Omega, \xi\Omega$ с размерностью энергии полностью определяют рассматриваемую модель. Для решения полученной замкнутой системы уравнений при конечных температурах использовалась итерационная процедура.

Погрешность в полном числе состояний не превышала 10^{-5} на примесный атом. Итерации проводились до тех пор, пока абсолютное изменение самосогласованных параметров для двух последних итераций не превышало 10^{-6} .

5. ПСЕВДОЩЕЛЬ

На рис. 2 сплошные кривые представляют электронный спектр нормального состояния примесного полупроводника при уровне легирования $x = 0.03$ и температуре $T = 40$ К. Были получены значения $\lambda = 0.352$ и $A = 0.597$. Зависимость ρ_{loc} (сплошная кривая на рис. 2а) показывает плотность локальных состояний на спин и на примесный атом и, соответственно, зависимость ρ_{ext} (сплошная кривая на

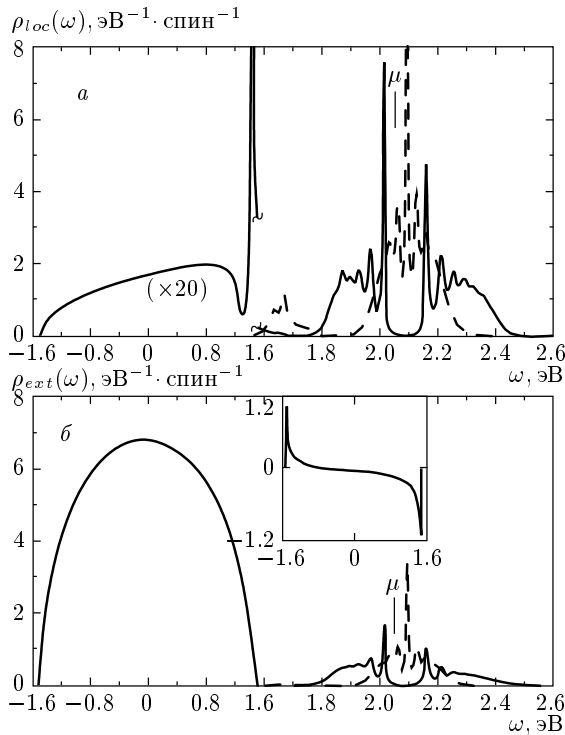


Рис. 2. Электронная структура спин-флуктуационного диэлектрического состояния при $x = 0.03$ и $T = 40$ К (сплошные кривые). Приведены спектральные плотности локальных (а) и распространенных (б) состояний. Вставка — изменение плотности распространенных состояний. Штриховыми кривыми показан электронный спектр в состоянии плохого металла, полученный при $\lambda = 0$, в области исходной запрещенной зоны. Использовались параметры $D_b = 1.5$ эВ, $\varepsilon_0 = D_b - 0.2$ эВ, $V_k = 1.2$ эВ, $U = 0.6$ эВ, $\xi = 5$, $\hbar\Omega = 20$ мэВ, $\gamma = 0.2\hbar\Omega$

рис. 2б) — одночастичную плотность распространенных состояний на спин и на примесный атом как в области исходной валентной зоны, так и в области исходной запрещенной зоны. Положение μ показано стрелкой на рис. 2 и оно выше верхнего края исходной валентной зоны полупроводника примерно на 0.5 эВ.

Как показано на рис. 2, в примесных зонах локальных и распространенных состояний открывается псевдощель $\Delta_{PG} = 146$ мэВ, в которой расположен химический потенциал. Плотность распространенных состояний в исходной зоне полупроводника существенно меняется. На вставке рис. 2б представлено изменение этой плотности, $\Delta\rho_{ext}(\omega)$, на спин и на примесный атом. Вблизи верхнего края зоны $\Delta\rho_{ext} < 0$ и, соответственно, плотность распространенных состояний значительно ниже затравочной плотности $\rho^{(0)}(\omega)$. Вблизи нижнего края зоны $\Delta\rho_{ext} > 0$ и плотность распространенных состояний больше затравочной. Изменение полного числа распространенных состояний в области исходной зоны оказывается отрицательным. Для приведенного на рис. 2 результата это изменение равно -0.215 состояний на спин и на примесный атом. Также в этой области появляется зона локальных состояний, которая на рис. 2а увеличена в 20 раз. Полное число этих состояний до исходной границы валентной зоны равно 0.242 на спин и на примесный атом.

Уменьшение полного числа распространенных состояний в области исходной валентной зоны связано с тем, что часть этих состояний отщепляется от исходной зоны и формирует две примесные зоны распространенных состояний в области исходной запрещенной зоны (рис. 2б). Полное число таких состояний во всей щели равно 0.215 состояний на спин и на примесный атом. Обе зоны определяются спектральными плотностями $\rho_{ext}(\mathbf{k}; \omega; A \pm \lambda)$. При $x = 0.03$ и $T = 40$ К вблизи химического потенциала эти две зоны разделены псевдощелью. По этой же причине появляется щель в спектре примесных зон локальных состояний. Эта спектральная плотность определяется величиной $\rho_{loc}(\omega; A \pm \lambda)$. Полное число таких состояний во всей щели равно 0.758 состояний на спин и на примесный атом. В результате в плотностях одночастичных состояний возникает псевдощель, а нормальное состояние является диэлектрическим.

Причиной возникновения диэлектрического состояния в легированном соединении при низких уровнях легирования и температурах являются спиновые флуктуации, представляемые параметром λ . Для того чтобы ясно показать роль спиновых флук-

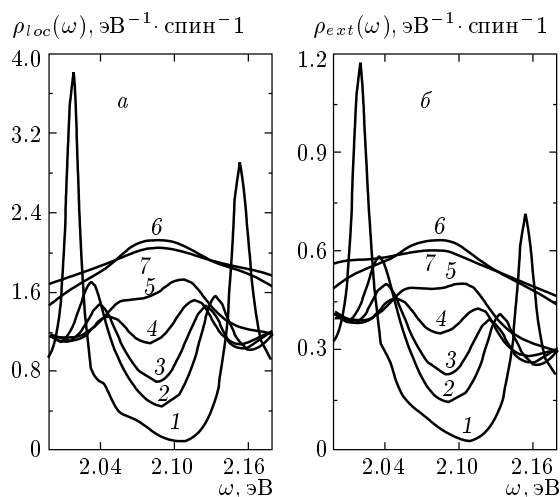


Рис. 3. Плотности локальных (а) и распространенных (б) состояний вблизи химического потенциала при температурном переходе диэлектрик – металл. Легирование фиксировано, $x = 0.03$. Кривые 1 – $T = 80$ К, 2 – $T = 140$ К, 3 – $T = 160$ К, 4 – $T = 180$ К, 5 – $T = 200$ К, 6 – $T = 240$ К, 7 – $T = 300$ К. Остальные параметры те же, что и в случае рис. 2

туаций в образовании диэлектрического состояния, на рис. 2 мы также привели рассчитанные плотности состояний (штриховые кривые), положив $\lambda = 0$. В результате псевдощель в спектральных плотностях отсутствует, а соединение находится в состоянии плохого металла, когда на поверхности Ферми сосуществуют зоны как локальных, так и распространенных состояний, причем полное число локальных фермионов в несколько раз больше числа распространенных. Химический потенциал в этом состоянии лежит на наибольших пиках плотностей локальных и распространенных состояний, и отчетливо видно его уменьшение в диэлектрическом состоянии.

На рис. 3 показано изменение электронных спектров локальных и распространенных состояний с ростом температуры при постоянном легировании $x = 0.03$. С ростом температуры параметр λ уменьшается, а две пары зон локальных $\rho_{loc}(\omega; A \pm \lambda)$ и распространенных $\rho_{ext}(\omega; A \pm \lambda)$ состояний сближаются и перекрываются. В результате величина псевдощели уменьшается с ростом температуры, а плотность состояний внутри нее растет. Такое поведение спектральной плотности в конечном счете приводит к плавному температурному переходу диэлектрик – металл.

Отметим три особенности. Первая состоит в том,

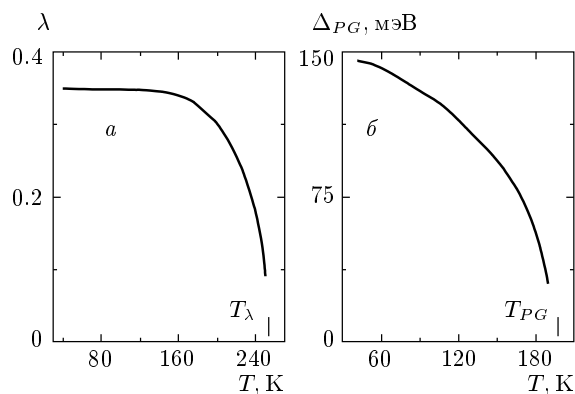


Рис. 4. Температурные зависимости спин-флуктуационного параметра (а) и псевдощели (б). Параметры и уровень легирования те же, что и в случае рис. 2

что в области псевдощели и, соответственно, вблизи химического потенциала плотность распространенных состояний существенно меньше плотности локальных состояний. Вторая связана с температурными зависимостями псевдощели Δ_{PG} и параметра λ . Полученные зависимости представлены на рис. 4. Величину Δ_{PG} определяли по провалу в спектральных плотностях. Этот провал наблюдается при $T < 200$ К (кривые 1–5 на рис. 3). Он отчетливо виден еще при $T < 180$ К. При T_{PG} псевдощель исчезает (кривые 6, 7 на рис. 3). Однако важно то, что спиновые флуктуации «выживают» до существенно более высоких температур. Так, при $T = 200$ К имеем $\lambda = 0.302$, т. е. эта величина уменьшилась всего лишь на 0.05 по сравнению с ее значением при $T = 40$ К. Температура, при которой спин-флуктуационный параметр λ обращается в нуль, обозначена на рис. 4а как T_λ . Третья особенность связана с химическим потенциалом. Его изменение во всем температурном диапазоне от 40 до 350 К составило примерно 44 мэВ. Он увеличивается с ростом температуры до $T \approx 250$ К, а далее уменьшается приблизительно на 2 мэВ.

Также были рассчитаны электронные спектры в зависимости от уровня легирования x при фиксированной температуре. В этом случае полученные результаты близки к представленным на рис. 3 за исключением того, что электронные спектры смещаются вправо при увеличении x . При постоянной температуре с ростом x сначала исчезает псевдощель в плотностях состояний вблизи химического потенциала (рис. 5б). Затем, при больших x , затухают спиновые флуктуации (рис. 5а). Соответственно $\lambda \rightarrow 0$,

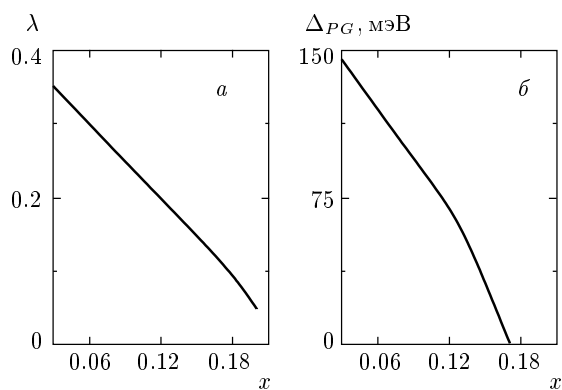


Рис. 5. Зависимости спин-флуктуационного параметра (а) и псевдощели (б) от уровня легирования при постоянной температуре $T = 40$ К. Остальные параметры те же, что и в случае рис. 2

а легированное соединение переходит в состояние парамагнитного плохого металла, в котором на поверхности Ферми сосуществуют зоны локальных и распространенных состояний, причем плотность локальных состояний значительно превосходит плотность распространенных состояний (см. рис. 2). Химический потенциал растет с ростом x , и его сдвиг составил 155 мэВ при изменении уровня легирования от 0.03 до 0.21.

Таким образом, в случае постоянной температуры при увеличении легирования сначала схлопывается псевдощель, а затем, при больших x , затухают спиновые флуктуации. При постоянном уровне легирования температура $T_{PG}(x)$, при которой исчезает псевдощель, меньше температуры $T_\lambda(x)$, при которой исчезают спиновые флуктуации. Поэтому в экспериментах, в которых измеряется плотность состояний (например, в туннельной спектроскопии), можно ожидать, что схлопывание псевдощели будет наблюдаться при $T \approx T_{PG}(x)$. Но спиновые флуктуации выживают до существенно более высоких температур. Они будут приводить к особенности в электропроводности при температуре $T_\lambda(x)$, как это будет показано ниже.

6. ПЕРЕХОДЫ ДИЭЛЕКТРИК – МЕТАЛЛ

На рис. 6 представлены вычисленные температурные зависимости удельного сопротивления $\rho = 1/\sigma$ примесного полупроводника при различных уровнях легирования. При $x = 0.03$ (рис. 6а) переход от полупроводникового типа температурной зависимости удельного сопротивления, когда сопро-

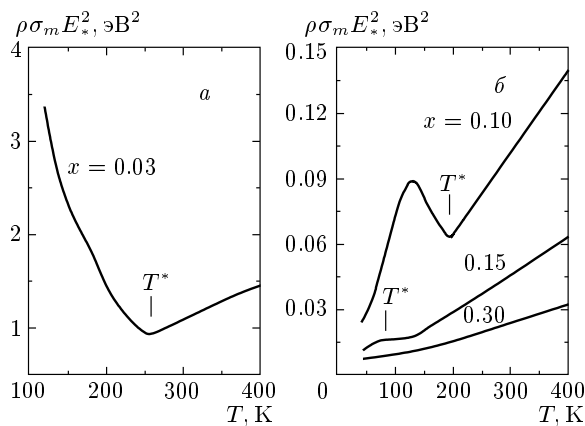


Рис. 6. Температурная зависимость сопротивления примесного полупроводника при уровнях легирования $x = 0.03$ (а) и $x = 0.10, 0.15, 0.30$ (б)

тивление растет с уменьшением температуры, к металлическому типу, для которого сопротивление почти линейно растет с ростом температуры, происходит вблизи температуры $T^* \approx 250$ К. Появление этого перехода связано с затуханием спиновых флуктуаций в легированном соединении. Этот вывод становится наглядным при сравнении температурной зависимости ρ при $x = 0.03$ с температурной зависимостью параметра λ спиновых флуктуаций, показанной на рис. 4 для того же уровня легирования. Видно, что $\lambda \rightarrow 0$ при температуре T_λ , которая близка к T^* для этого уровня легирования.

Подчеркнем, что псевдощель Δ_{PG} в спектре одночастичных состояний при $x = 0.03$ исчезает при существенно более низких температурах, $T_{PG} \approx 180$ К (см. рис. 4). При этой температуре уже имеется металлическое состояние, но оно необычно тем, что в нем присутствуют спиновые флуктуации. С ростом температуры они затухают, а сопротивление продолжает уменьшаться вплоть до температуры $T_\lambda(x)$.

С ростом уровня легирования уже при низких температурах появляется конечная плотность одночастичных состояний в области псевдощели (см. рис. 3). Температурная зависимость удельного сопротивления ρ при $x = 0.10$ показана на рис. 6б. Здесь существуют два перехода диэлектрик–металл. В области высоких температур имеется переход диэлектрик–парамагнитный металл. Температура перехода $T^* \approx 200$ К хорошо коррелирует с температурой T_λ для $x = 0.10$.

Кроме того, при $x = 0.10$ в области низких температур имеется максимум сопротивления (рис. 6б),

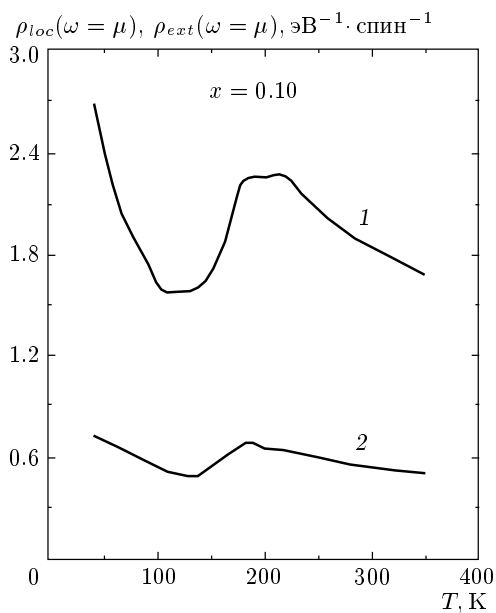


Рис. 7. Температурное изменение плотности состояний на поверхности Ферми при $x = 0.10$ для локальных (1) и распространенных (2) состояний. Остальные параметры расчета те же, что и в случае рис. 2

который соответствует переходу металл – диэлектрик с ростом температуры. Этот переход связан с изменением плотности состояний внутри псевдощели. В ее области плотность состояний на поверхности Ферми конечна и растет с уменьшением температуры, как показано на рис. 7. В результате при низких температурах температурная зависимость сопротивления имеет металлических характер.

Поскольку переход металл – диэлектрик в области низких температур связан с псевдощелью и изменением в ней плотности состояний, его можно назвать псевдощелевым переходом.

Отметим, что такие два перехода диэлектрик – металл действительно наблюдаются в недодопированной области фазовой диаграммы соединения $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. С этой целью интересно сравнить результаты расчета, показанные на рис. 6б при $x = 0.10$, с экспериментальными данными [5], приведенными на рис. 1 для монокристалла $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ с $x = 0.07$.

С ростом уровня легирования максимум сопротивления в области низких температур приближается с минимумом сопротивления в области высоких температур $T \approx T_\lambda$. Это продемонстрировано на рис. 6б для случая $x = 0.15$.

При высоких уровнях легирования сопротивле-

ние монотонно увеличивается с ростом температуры (рис. 6б для $x = 0.30$), как этого и следует ожидать для плохого парамагнитного металла.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенного исследования обнаружено псевдощелевое состояние и плавные переходы диэлектрик – металл в примесных зонах легированных полупроводников при изменении как температуры, так и уровня легирования. Для описания примесного полупроводника использовалась модель Андерсона – Холстейна, в которой учитывается ансамбль примесных узлов, случайным образом распределенных в исходной решетке, и учтены электронные корреляции на примесных орбиталях. Итоговая фазовая диаграмма представлена на рис. 8, где стрелками указаны изученные переходы.

Показано, что причиной возникновения диэлектрического состояния при низких уровнях легирования полупроводника и низких температурах являются спиновые флуктуации. При этом в примесных зонах локальных и распространенных состояний открывается псевдощель, в которой расположен химический потенциал. Псевдощель характеризуется энергетической областью с низкой плотностью одно-

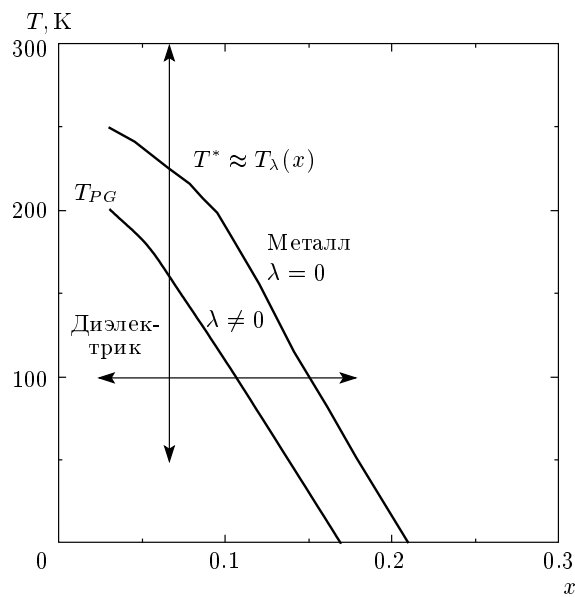


Рис. 8. Фазовая диаграмма примесного полупроводника в зависимости от уровня легирования x . Кривая $T_\lambda(x)$ определяется решением уравнения $\lambda(x, T_\lambda) = 0$; кривая $T_{PG}(x)$ — решением уравнения $\Delta_{PG}(x, T_{PG}) = 0$

частичных состояний. При постоянном уровне легирования температура $T_{PG}(x)$, при которой исчезает псевдощель, меньше температуры $T_{\lambda}(x)$, при которой исчезают спиновые флуктуации. При $T > T_{\lambda}(x)$ примесный полупроводник переходит в состояние парамагнитного плохого металла, у которого на поверхности Ферми сосуществуют примесные зоны локальных и распространенных состояний. В случае постоянной температуры при увеличении легирования сначала схлопывается псевдощель, а затем, при больших x , затухают спиновые флуктуации.

В результате исследования сопротивления примесного полупроводника найдены два различных перехода диэлектрик–металл, при которых происходит изменение температурной зависимости сопротивления от полупроводникового типа к металлическому типу. Первый переход диэлектрик \rightarrow плохой металл имеет место при $T^*(x) \approx T_{\lambda}(x)$ и обусловлен затуханием спиновых флуктуаций в примесном полупроводнике. Второй (псевдощелевой) переход плохой металл \rightarrow диэлектрик в области низких температур связан с псевдощелью и температурным изменением в ней плотности состояний.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (грант № 04-02-17474а).

ЛИТЕРАТУРА

1. T. Timusk and B. Statt, Rep. Progr. Phys. **62**, 61 (1999).
2. J. L. Tallon and J. W. Loram, Physica C **349**, 53 (2001).
3. М. В. Садовский, УФН **171**, 539 (2001).
4. S. Chakraverty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and Ch. Nayak, Phys. Rev. B **63**, 94503 (2001).
5. B. Batlogg, H. Y. Hwang, H. Tagaki et al., Physica C **235–240**, 130 (1994).
6. L. Alff, D. Manske, B. Welter et al., Nature **422**, 698 (2003).
7. J. L. Luo, J. W. Loram, J. R. Cooper et al., Physica B **284–288**, 1045 (2000).
8. U. Thisted, J. Nyhus, T. Suzuki, and K. Fossheim, Phys. Rev. B **67**, 184510 (2003).
9. P. Dai, H. A. Mook, G. Aeppli et al., Nature **406**, 965 (2000).
10. D. Pines, Physica C **341**, 59 (2000).
11. J. G. Bednorz, K. A. Muller, T. Riesterer, and B. Reichl, Phys. Rev. B **35**, 8804 (1987).
12. H. Namatame, A. Fujimori, Y. Tokura et al., Phys. Rev. B **41**, 7205 (1990).
13. R. O. Anderson, R. Claessen, J. W. Allen et al., Phys. Rev. Lett. **70**, 3163 (1990).
14. N. P. Armitage, F. Ronning, D. H. Lu et al., Phys. Rev. Lett. **88**, 257001 (2002).
15. T. Watanabe, T. Takahashi, S. Suzuki et al., Phys. Rev. B **44**, 5316 (1991).
16. Г. М. Элиашберг, в сб. *Физические свойства высокотемпературных сверхпроводников*, под ред. Д. М. Гринберга, Мир, Москва (1990), с. 505.
17. E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
18. R. B. Laughlin, E-print archives, cond-mat/0209269.
19. B. A. Bernevig, R. B. Laughlin, and D. I. Santiago, Phys. Rev. Lett. **91**, 147003 (2003).
20. F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **90**, 207002 (2003).
21. E. Lai and R. J. Gooding, Phys. Rev. B **57**, 1498 (1998).
22. P. P. Edwards, N. F. Mott, and A. S. Alexandrov, J. Supercond. **11**, 151 (1998).
23. P. C. Hammel, B. W. Statt, R. L. Martin et al., Phys. Rev. B **57**, R712 (1998).
24. J. K. Perry, J. Tahir-Kheli, and W. A. Goddard, Phys. Rev. B **65**, 144501 (2002).
25. F. D. M. Haldane and P. W. Anderson, Phys. Rev. B **13**, 2553 (1976).
26. А. И. Агафонов, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **124**, 394 (2003).
27. К. А. Кикоин, *Электронные свойства примесей переходных металлов в полупроводниках*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
28. А. И. Агафонов и Э. А. Манькин, Phys. Rev. B **52**, 14571 (1995).
29. F. Yonezawa and T. Matsubara, Progr. Theor. Phys. **35**, 357 (1966).
30. А. А. Абрикосов, А. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, Москва (1962).
31. А. И. Агафонов, Э. А. Манькин, ЖЭТФ **109**, 1405 (1996).
32. С. В. Тябликов, *Методы квантовой теории магнетизма*, Наука, Москва (1966).