

ЭЛЕКТРОННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ ФАЗ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ТИПА ВТСП

© Э.Л.Нагаев

Институт физики высоких давлений Российской академии наук,
142092 Троицк, Московская обл., Россия
(Поступила в Редакцию 29 апреля 1996 г.)

Исследовано электронное разделение фаз в квазидвумерных вырожденных антиферромагнитных полупроводниках типа ВТСП. Независимо от конкретного типа разделения фаз из-за кулоновского взаимодействия обе фазы перемешаны, образуя сложную геометрию. При достаточно больших концентрациях носителей все или почти все они оказываются сосредоточенными в кристаллических плоскостях, образующих одномерную сверхрешётку внутри кристалла. Эти плоскости отделены друг от друга изолирующими плоскостями или плоскостями в смешанном состоянии.

В работе исследуется разделение фаз в квазидвумерных вырожденных антиферромагнитных полупроводниках типа ВТСП. Хотя разделение фаз было теоретически предсказано задолго до открытия ВТСП [1], их появление заставило по-новому взглянуть на это явление. Следует различать два типа разделения фаз: электронное разделение фаз, происходящее при замороженной примеси [1], и примесное разделение фаз, происходящее в материалах с подвижными примесными атомами [2]. Здесь будет рассматриваться только электронное разделение фаз.

Энергия носителей заряда в магнитном кристалле зависит от типа магнитного упорядочения. Если при исходном магнитном упорядочении энергия носителей не минимальна, они стремятся установить в кристалле упорядочение, при котором их энергия ниже. При этом носителям приходится преодолевать сопротивление обменного взаимодействия между магнитными атомами, установившего исходное упорядочение. Если концентрация носителей недостаточно велика, они не могут изменить тип упорядочения во всем кристалле. Но они могут собраться в определенной части кристалла и в ней изменить тип упорядочения, оставив остальную его часть в исходном магнитном состоянии и без носителей заряда.

Поскольку фазы заряжены противоположно, возникают сильные кулоновские силы, которые стремятся перемешать обе фазы. Оптимальная геометрия двухфазного состояния определяется конкуренцией между кулоновской энергией и граничной энергией высокопроводящих областей. Следует заметить, что в применении к этому явлению общепринятый термин «разделение фаз» неточен: обе фазы связаны кулоновскими силами в единую систему, и из-за этих сил отделить одну фазу от другой нельзя.

Как показано в [1,3], в изотропных кристаллах при относительно небольших концентрациях носителей области высокопроводящей измененной фазы образуют капли, расположенные внутри доминирующей изолирующей исходной фазы. Если бы кристалл был идеально совершенным, то эти капли образовывали бы внутри него периодическую структуру. В этом отношении физическая картина двухфазного состояния напоминает кристалл Вагнера. Если исходная фаза антиферромагнитная, а измененная фаза ферромагнитная, то такая картина соответствует также суперпозиции нелинейных волн плотности спина и заряда.

Когда плотность носителей растет, при некоторой плотности происходит протекание электронной жидкости и измененного магнитного порядка. Это изменение в топологии высокопроводящей части кристалла с многосвязной на односвязную эквивалентно переходу изолятор-металл. После протекания уже капли изолирующей фазы должны образовывать периодическую структуру. Следует подчеркнуть, что рассматриваемое двухфазное состояние является основным состоянием кристалла и не имеет ничего общего с разделением фаз при фазовом переходе первого рода.

В проводящих магнитных системах при $T = 0$ возможно разделение не только на ферро- и антиферромагнитную фазы, но и другие типы разделения фаз, например разделение на различные антиферромагнитные фазы [4].

Экспериментально электронное разделение фаз было впервые обнаружено в несверхпроводящих EuSe и EuTe (см. работы [5-7] и их теоретический анализ в [3]). Имеются экспериментальные данные, которые свидетельствуют в пользу того, что это явление возможно и в ВТСП (см. [8,9]), хотя примесное разделение фаз, осуществляющееся при подвижных примесных атомах и соответствующее их неоднородному распределению по кристаллу, более распространено в них.

Эта работа посвящена электронному разделению фаз в ВТСП и родственных им квазидвумерных материалах. Вряд ли сам факт сверхпроводимости может существенно сказаться на исследуемом явлении, поскольку энергия спаривания носителей в них мала по сравнению с остальными характерными электронными энергиями. Соответственно разделение фаз в ВТСП происходит обычно при температурах существенно более высоких, чем критическая температура перехода в сверхпроводящее состояние [8,9]. Поэтому далее будет просто исследоваться специфика этого явления, обусловленная квазидвумерностью. Можно ожидать, что результаты для них будут существенно отличаться от результатов для изотропных систем, исследованных в [1,3].

Конкретно топология системы с разделением фаз в квазидвумерном случае должна быть совершенно иной, чем в изотропном случае. С топологией же связаны также фундаментальные свойства двухфазного состояния, как протекание электронной жидкости по кристаллу, т.е. наличие у кристалла как целого металлических и сверхпроводящих свойств. Исследование структуры двухфазного состояния ниже будет проведено в максимально общем виде, справедливом при любом типе разделения фаз.

1. Общая картина разделения фаз в квазидвумерных системах

Здесь будет обсуждено разделение фаз в квазидвумерных системах, характеризующихся двумерным движением электронов в атомных плоскостях (их переходы между плоскостями не учитываются) и трехмерным кулоновским взаимодействием между зарядами. Разделение фаз состоит в спонтанном возникновении внутри исходной фазы областей измененной фазы, которые являются потенциальными ямами для носителей заряда (для определенности речь будет идти об электронах проводимости, хотя абсолютно все сказанное далее справедливо и для дырок).

Например, если исходная фаза является шахматной антиферромагнитной, а измененная фаза — ферромагнитной, глубина потенциальной ямы U в рамках $s-d$ -модели со слабой $s-d$ -связью ($AS \ll W$) равна $AS/2$, где A — интеграл $s-d$ -обмена, S — спин d -атомов, W — ширина s -зоны проводимости. Если же измененная фаза — слоистая антиферромагнитная, то глубина потенциальной ямы составляет порядка $(AS)^2/W$ [8].

Для вырожденных полупроводников типична ситуация, когда каждая область измененной фазы содержит много электронов (или дырок), поскольку можно уменьшить расходы энергии обмена между магнитными атомами на установление новой фазы, помещая несколько электронов в одну и ту же область, вместо того, чтобы создать отдельные области для каждого электрона.

Для вырожденных полупроводников всегда выполняется неравенство $\mu \gg e^2/\epsilon$, где μ — энергия Ферми, ϵ — диэлектрическая проницаемость. Это позволяет вычислять энергию системы при помощи вариационного принципа, взяв в качестве пробных функций волновые функции невзаимодействующих друг с другом электронов в потенциальной яме.

Далее из неустойчивости антиферромагнитной фазы относительно электронов проводимости в двумерных системах, доказанной в [8], следует, что все электроны проводимости сосредоточены внутри измененной фазы, а в исходной фазе при $T = 0$ электронов не остается, и, следовательно, она изолирующая. Тогда с учетом того, что все N_e электронов проводимости кристалла сосредоточены в измененной фазе, полная энергия системы дается выражением

$$E = K_A + K_B + E_C + E_M - UN_e. \quad (1)$$

Здесь сумма $K_A + K_B$ представляет собой кинетическую энергию электронов (см. далее), E_C — энергия электростатического взаимодействия электронов и доноров друг с другом (исходная и новая фазы заряжены противоположно, поскольку в первой из них все доноры ионизованы, их заряд не скомпенсирован, а во второй находится избыток электронов), E_M — энергия обменного взаимодействия между локализованными d -спинами, затрачиваемая на перестройку магнитной структуры. Наконец, последний член представляет собой понижение потенциальной энергии в измененной фазе.

Далее считается, что в каждой области измененной фазы находится много электронов, так что выполняется неравенство $k_F L \gg 1$, где

k_F — импульс Ферми, L — характерный размер области измененной фазы. В этих условиях, несмотря на пространственное квантование электронных уровней, удается ввести сглаженную плотность уровней, являющуюся непрерывной функцией энергии. С ее помощью можно вычислять различные интегральные величины, например энергию системы электронов. В трехмерном случае такой подход, соответствующий приближению Борна-Оппенгеймера, при квадратичном законе дисперсии для электронов в наиболее общем виде был реализован в [10]. В этой работе (см. Приложение), используя совершенно иную методику, удалось осуществить аналогичную программу для двумерной системы.

В результате проведенного в Приложении расчета получено, что сглаженная плотность уровней $g(E)$ (П18) дается суммой двух членов, первый из которых, $g_A(E)$, пропорционален площади поверхности, внутри которой заключены электроны. Второй же, $g_B(E)$, пропорционален длине периметра границы этой области. Именно он хранит память о пространственном квантовании электронных уровней, которое и приводит к появлению граничной энергии (аналогу поверхностной энергии в трехмерном случае). Этот член в отличие от первого зависит от граничных условий. Здесь по смыслу задачи, если размер области существенно превышает глубину затухания электронной волновой функции вне потенциальной ямы, можно положить в (П2) $\kappa \rightarrow \infty$.

Соответственно при помощи (П18) кинетическая энергия электронов, локализованных в какой-то области, в квазиклассическом приближении может быть представлена как сумма «основной» и «граничной» частей K_A и K_B подобно ее делению на объемную и поверхностную части в трехмерном случае. При этом следует иметь в виду, что в случае ферромагнитной потенциальной ямы, если фермиевская энергия μ меньше AS , все электроны поляризованы по спину. Тогда

$$K_2 = \lambda \pi \nu^2 S / m a^2, \quad (2)$$

$$K_1^F = 2 \lambda^{1/2} (\pi \nu^3)^{1/2} L / 3 m a^2, \quad (3)$$

где S и L — площадь и периметр области, занятой электронами, ν — число электронов на атом, величина λ равна единице для ферромагнитного упорядочения и 0.5 для немагнитных потенциальных ям, когда электроны не поляризованы по спину (они захвачены спиновой жидкостью или фазой Ландау внутри антиферромагнетика Нееля). Остальные энергии, фигурирующие в (1), в расчете в общем виде не нуждаются и ниже будут конкретизированы для рассмотренных там случаев. Следует только заметить, что при вычислении кулоновской энергии вместо тензорной диэлектрической проницаемости будет использоваться скалярная величина ϵ , поскольку относительно небольшие различия в компонентах ϵ_{ii} не могут повлиять на общий характер проводимых ниже оценок.

Некоторые качественные выводы о структуре двухфазного состояния можно сделать без детальных расчетов. Сосредоточение носителей заряда в определенных областях кристалла означает появление пространственного электрического заряда, который повышает энергию системы за счет появления кулоновского вклада в нее E_C : фазы становятся противоположно заряженными по отношению друг к другу.

Если бы кристалл разделился на две области с различными фазами в них, то кулоновская энергия системы в расчете на один электрон оказалась бы макроскопически велика.

Чтобы ее уменьшить, области различных фаз должны перемешаться друг с другом. Но при этом растет длина границы между фазами (и, следовательно, граничная энергия). Таким образом, следует искать геометрию, при которой энергия системы была бы минимальна. Иными словами, параметры рассматриваемой вариационной задачи должны характеризовать геометрию смещенного двухфазного состояния.

2. Разделение фаз в двумерных системах

В этом разделе геометрия двухфазного состояния плоского проводника будет рассмотрена в полной аналогии с трехмерным случаем [1,3]: при относительно малых средних плотностях носителей ν_0 измененная магнитная фаза, содержащая их, состоит из кругов внутри матрицы из доминирующей фазы. После достижения средней плотностью значения ν_p , с которого начинается перколяция, основной частью кристалла становится измененная высокопроводящая фаза, внутри которой образуют периодическую структуру круги из изолирующей первоначальной фазы.

Используются два вариационных параметра: 1) отношение $x = S_i/S_n$, где S_i и S_n — площади исходной и вновь образовавшейся фаз соответственно ($S_i + S_n = S$, где S — полная площадь системы); 2) радиус R включения неосновной фазы.

В такой геометрии кулоновская энергия системы может быть оценена путем обобщения идеи сфер Вигнера из теории кристаллов. Можно разделить систему на круги радиуса R_W . Каждый круг содержит только одно включение, центр которого совпадает с центром этого круга. Радиус R_W определяется из условия, чтобы полный заряд внутри круга Вигнера обращался в нуль. В случае, когда включение является высокопроводящим с плотностью заряда на узел $e\nu_0$, а его окружение — изолирующим с плотностью $-e\nu_0$, это означает равенство

$$xR^2 = (R_W^2 - R^2). \quad (4)$$

Тогда получается следующее выражение для потенциала φ :

$$\begin{aligned} \varphi(r) &= (e\nu_0/\varepsilon a^2)\Phi(r), \\ \Phi(r) &= x \int_0^R r_1 dr_1 k(r_1) - \int_R^{R_W} r_1 dr_1 k(r_1), \\ k(r_1) &= 4(\tau + r_1)^{-1} K \left[2(\tau r_1)^{1/2}/(1 + r_1) \right], \end{aligned} \quad (5)$$

$K(x)$ — полный эллиптический интеграл первого рода.

С учетом (5) получается следующее выражение для кулоновской энергии одиночного круга Вигнера ($\Theta(x)$ — функция Хевисайда):

$$E'_C = (e^2\nu_0^2/2\varepsilon a^2) Q(R, x),$$

$$Q = \int d^2r \Phi(r) \left\{ x \Theta(R-r) - \Theta(R_W-r) \Theta(r-R) \right\}. \quad (6)$$

Если учесть, что полное число кругов Вигнера в системе равно $S/[\pi R^2(1+x)]$, что полное число электронов проводимости N_e фиксировано и что плотность носителей заряда в измененной фазе $\nu = \nu_0(1+x)$, тогда из (2), (3), (6) получается следующее выражение для полной энергии в расчете на электрон:

$$H = E/N_e = \lambda \pi n_0(1+x) a N_e / m + (4/3)(\pi \lambda n_0 a)^{1/2} (1+x)^{1/2} / m R + \\ + e^2 \nu_0 Q(R, x) / 2\pi \epsilon R^2(1+x) + D/[\nu(1+x)] - U, \quad (7)$$

где D — затраты обменной энергии на атом при изменении магнитного упорядочения (выражение, пропорциональное D , соответствует энергии E_M в (1)). Аналогичное выражение получается, когда доминирующей является новая фаза ($x < 1$).

Как видно из (7), только электронная граничная энергия (второй член в нем) и кулоновская энергия (третий член) зависят от R . Тогда, минимизируя полную энергию (7) по R , можно получить выражение для R через x . После подстановки его в (7) и последующей минимизации по x получается трансцендентное уравнение относительно x , которое легко можно решить численными методами. Такая программа будет проведена до конца в следующих разделах.

3. Разделение фаз в квазидвумерных кристаллах. Чередующиеся плоскости

Очевидно, геометрия двухфазного состояния в случае квазидвумерного кристалла должна быть достаточно сложной. Здесь будет рассмотрена следующая модель. Каждая область измененной фазы, в которой сосредоточены носители заряда, представляет собой плотноупакованную кристаллографическую плоскость (плоскость XU). Она расположена в центре области истощения, откуда все носители перешли в эту высокопроводящую плоскость. Такая область содержит несколько плоскостей, кристаллографически эквивалентных высокопроводящей плоскости, и ограничена двумя из них.

В рассматриваемом здесь случае нужен только один вариационный параметр $x = V_i/V_n$, где V_i и V_n — объемы исходной и вновь возникшей фаз соответственно. Кинетическая энергия K_A и магнитная энергия E_M даются теми же выражениями, что и в (7). Граничная часть энергии K_B здесь асимптотически мала и по этой причине отброшена.

Кулоновская энергия рассчитывается в предположении, что заряд в области истощения распределен равномерно. Если считать для простоты записи постоянную решетку вдоль оси Z тоже равной a , как и в плоскости XU , то ширина области, полностью компенсирующей заряд центральной высокопроводящей плоскости, равна xa . Строго говоря, такой подход оправдан при $x \gg 1$, но он может давать разумные оценки до $x \cong 1$. При не очень больших x подход самосогласован, если получающиеся значения x близки к целым числам. Если это не так, значительное количество электронов проводимости остается в истощенной области, в противоречии со сделанным выше предположением.

Тогда некоторые плоскости внутри истощенной области должны быть в двухфазном состоянии, описанном в предыдущем разделе.

Используя элементарную электростатику, получаем

$$E_C = (5\pi/6)x^3 e^2 a^2 n_0 N_e / \varepsilon(1+x). \quad (8)$$

Если пренебречь кулоновским взаимодействием, тогда минимизация энергии (1) по x приводит к следующему выражению для оптимальной энергии системы на электрон проводимости H в явной форме:

$$x = -1 + (1/\nu)(Dma^2/\pi\lambda)^{1/2} \quad (\hbar = 1), \quad (9)$$

$$H = 2(\pi\lambda D/a^2 m)^{1/2} - U, \quad 1/2ma^2 = t. \quad (10)$$

Как видно из (10), в пределе $\varepsilon \rightarrow \infty$ энергия автолокализации H не зависит от электронной плотности ν , но она зависит от того, поляризованы или не поляризованы электроны по спину. Здесь условие для автолокализации полностью определяется конкуренцией между вызванным ей увеличением кинетической энергии и расходами энергии прямого обмена.

Результат (10) следует сравнить с условиями одноэлектронной автолокализации носителей заряда, установленными в двумерном случае в [11],

$$D < 0.03333U^2/t. \quad (11)$$

Как следует из (11), если эффективная масса носителя близка к истинной, тогда критические значения U , начиная с которых становится возможной автолокализация, равны 0.087 eV для $D = 0.001$ eV, 0.27 eV для $D = 0.01$ eV и 0.87 eV для $D = 0.1$ eV. Последняя оценка показывает, что в несверхпроводящих керамиках Cu-O, где двумерные антиферромагнитные корреляции наблюдаются при температурах выше 1000 K (см. [8]), критическое значение U настолько велико, что одноэлектронное разделение фаз вряд ли может осуществляться.

Условие кооперативной автолокализации, следующее из (10), оказывается гораздо более благоприятным, чем (11): для электронов, поляризованных по спину, критические значения U на 10% ниже, чем приведенные выше. Еще больше разница для электронов, не поляризованных по спину. Например, кооперативное разделение фаз при $D = 0.1$ eV начинается при $U_c = 0.496$ eV, т. е. при значении U на 55% ниже, чем одноэлектронное.

Разумеется, учет кулоновского взаимодействия приведет к повышению критического значения U_c . Численные расчеты показывают, что это повышение особенно сильно при малых электронных концентрациях, при умеренных же концентрациях влияние кулоновского взаимодействия не столь велико. Например, при $\varepsilon = 10$ и $D = 0.1$ eV величина U_c уменьшается от 1.695 eV при $\nu = 0.01$ ($x = 7.51$) до 0.604 eV при $\nu = 0.13$ ($x = 0.9$). Если же взять $\varepsilon = 20$, то $U_c = 0.553$ eV при $\nu = 0.15$ ($x = 0.95$). Это показывает, что кооперативное разделение фаз возможно и в материалах типа ВТСП.

Можно также заключить, что кооперативное разделение фаз должно происходить при достаточно высоких электронных концентрациях, а при малых концентрациях должно осуществляться одноэлектронное разделение фаз, при котором кулоновское взаимодействие несущественно.

Были исследованы еще две возможные модели разделения фаз.

1) Модель нитей. Двухфазные плоскости, обсужденные в разделе 3, состыкованы так, что круги одной и той же фазы из соседних плоскостей накладываются друг на друга и в результате образуются прямые цилиндры из областей этой фазы, пронизывающие кристалл. В этом случае проблема протекания в точности эквивалентна проблеме, обсуждавшейся в разделе 3.

2) Модель капель. При относительно небольших электронных плотностях вновь возникшая фаза состоит из эквивалентных круговых цилиндров конечной длины, имитирующих сферические капли в изотропном трехмерном случае, рассмотренном в [1,3]. После достижения концентрации протекания ту же форму имеют изолирующие капли первоначальной фазы внутри доминирующей измененной фазы.

Эти две модели могут быть исследованы только численно. Результаты показывают, что обе эти модели значительно менее энергетически выгодны, чем первая модель. Например, если новая фаза ферромагнитная и электроны проводимости полностью поляризованы по спину, тогда при $\epsilon = 10$, $D = 0.001$ eV получаются следующие значения U_c для этих трех моделей в том порядке, в котором они названы: при $\nu = 0.001$ они равны 0.1747, 0.1950 и 0.23 eV. При $\nu = 0.005$ они составляют 0.0976, 0.1873 и 0.1517 eV соответственно.

Исследование, представленное в этой работе, стало возможным частично благодаря гранту N MUB300 Международного научного фонда и частично благодаря гранту № 94-02-03332-а Российского фонда фундаментальных исследований.

ПРИЛОЖЕНИЕ. Электронная плотность уровней в двумерных системах конечных размеров

Задача о сглаженной плотности уровней для изотропных трехмерных систем решена в общем виде в [10] разложением по $1/k_F L$, где k_F — импульс Ферми, а L — типичный размер образца. Там было показано, что если форма образца регулярна на расстояниях $\propto 1/k_F$, плотность уровней зависит только от объема и площади поверхности образца, но не зависит от его формы. Про те же причины, что и в [10], можно считать, что и в двумерном случае плотность уровней не зависит от формы образца, а зависит только от его площади и периметра.

При этом предположении можно взять модель с простейшей геометрией двумерной системы — узкую полоску длины $R \rightarrow \infty$ вдоль оси X и ширины L вдоль оси Z . Это позволяет использовать значительно более простую процедуру расчета, чем в [10]. Рассматривается одноэлектронное волновое уравнение

$$-(1/2m)\Delta\Psi = E\Psi \quad (\text{П1})$$

с линейными граничными условиями наиболее общего вида

$$\partial\Psi/\partial n + \kappa\Psi = 0. \quad (\text{П2})$$

Если $\kappa > 0$, в электронном спектре имеется только двумерная зона (аналог объемной в трехмерном случае), и собственные функции

уравнения (П1) берутся в виде

$$\Psi_{kq} = \exp(iqX)\psi(Z),$$

$$\psi(Z) = \sin k_s Z \quad \text{или} \quad \cos k_c Z. \quad (\text{П3})$$

Тогда, согласно (П2), дозволённые значения поперечного импульса k_s или k_c определяются из трансцендентных уравнений

$$k_s = (2\pi n/L) - (2/L) \arctg(k_s/\kappa), \quad (\text{П4})$$

$$k_c = (2\pi n/L) + (2/L) \operatorname{arccctg}(k_c/\kappa),$$

$$n = 0, 1, 2, \dots, \quad 0 \leq k_s, \quad k_c \leq \pi. \quad (\text{П5})$$

Плотность орбитальных состояний $g(E)$ дается выражением

$$g(E) = \sum \left[\delta(E - E_{k_s q}) + \delta(E - E_{k_c q}) \right] \equiv g_s + g_c. \quad (\text{П6})$$

Ниже будет использовано интегральное представление для δ -функции

$$g_s = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(iEt) \sum \exp \left\{ -it(k^2 + q^2)/2m \right\}, \quad k \equiv k_s. \quad (\text{П7})$$

Суммирование по q производится заменой его на интегрирование

$$\begin{aligned} \sum \exp(-itq^2/2m) &= R/(2\pi\tau)^{1/2} \left\{ C \left(\pi\tau^{1/2}/a \right) - i \operatorname{sign}(t) S \left(\pi\tau^{1/2}/a \right) \right\} \simeq \\ &\simeq R(1/8\pi\tau)^{1/2} (1 - \operatorname{sign} t), \quad \tau = |t|/2m, \end{aligned} \quad (\text{П8})$$

где S и C — интегралы Френеля. Здесь рассматриваются только энергии, малые по сравнению с шириной зоны проводимости W . Поскольку в подинтегральном выражении в (П7) существенны только $t \propto 1/E$, аргумент интегралов Френеля в этом выражении составляет порядка $(W/E)^{1/2} \gg 1$, что оправдывает использование асимптотических выражений для интегралов Френеля.

При суммировании по k в (П7) используется формула суммирования Эйлера–Маклорена

$$\sum_{n=1}^{N_L} \exp \left\{ -itk^2(n)/2m \right\} \simeq \int_1^{\infty} dn \exp \left\{ -itk^2(n) \right\} + \exp \left\{ -itk^2(1)/2m \right\} \equiv \sum_s. \quad (\text{П9})$$

Член, соответствующий верхнему пределу суммирования $N_L \propto L/a$, опущен, поскольку он осциллирует с частотой $W \gg E$ и по этой причине вносит малый вклад в плотность уровней.

На этом этапе целесообразно перейти от интеграции по n к интеграции по k . С учетом (П4) получается

$$\sum_s = (L/2\pi) \int_{k_1}^{\infty} dk \left\{ 1 + 2/[\kappa L(1 + k^2/\kappa^2)] \right\} \exp \left\{ -itk^2/2m \right\} + 1/2, \quad (\text{П10})$$

где $k_1 \equiv k_s(1) \leq 1/L$ — наименьший корень уравнения (П4). Учтено неравенство $tk_1^2/m \ll 1$.

Перед интегриацией по k в (П7), (П9) целесообразно провести интегриацию по t с учетом (П8)

$$R/2(m/\pi)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(it\lambda)(1 - i \operatorname{sign} t)|t|^{-1/2} = (2m/\lambda)^{1/2} R\Theta(\lambda), \quad (\text{П11})$$

где $\Theta(\lambda)$ — функции Хевисайда, $\lambda = E - k^2/2m$. Интегриацией по k тогда получается

$$g_s = g_A/2 + g_{Bs}, \quad (\text{П12})$$

$$g_A = LRm\Theta(E)/2\pi, \quad (\text{П13})$$

$$g_{Bs} = Rm/4\pi^2 \left\{ 2 \left[-L \arcsin k_s(1)/p + \pi (p^2 + \kappa^2)^{-1/2} \right] + \pi/p \right\} \Theta(E), \quad (\text{П14})$$

где g_A — плотность уровней без учета граничных эффектов, g_{Bs} — вклад в нее от границы (так как $k_1 \simeq 2\pi/L$, этот вклад пропорционален R), $p = (2mE)^{1/2}$.

Расчет g_c производится аналогичным образом. Он дает

$$g_c = g_A/2 + g_{Bc}, \quad (\text{П15})$$

$$g_{Bc} = Rm/2\pi^2 \left\{ -L \arcsin k_c(0)/p + \pi (p^2 + \kappa^2)^{-1/2} + \pi/p \right\} \Theta(\lambda), \quad (\text{П16})$$

где, согласно (П5), $k_c(0) \simeq \pi/L$.

Для общности можно рассмотреть также случай $\kappa < 0$, когда существует одномерная энергетическая зона с состояниями, локализованными вблизи границы образца. Ее дно лежит на $\kappa^2/2m$ ниже, чем дно двумерной зоны. Эта граничная зона вносит дополнительный вклад в плотность уровней (П13)–(П16)

$$g_b = \sum \delta \left\{ (q^2 - \kappa^2)/2m - E \right\} = R/4\pi (\kappa^2 + 2mE)^{-1/2}. \quad (\text{П17})$$

Таким образом, полная плотность уровней дается выражением

$$g = g_A + g_B,$$

$$g_B = g_{B1} + g_{B2} + g_b. \quad (\text{П18})$$

Список литературы

- [1] Э.Л. Нагаев. Письма в ЖЭТФ **16**, 558 (1972); В.А. Кашин, Э.Л. Нагаев. ЖЭТФ **66**, 2105 (1974).
- [2] A.A. Kastalskii, S.B. Maltsev. Solid State Commun. **17**, 107 (1975); B. Vengalis, A. Kastalskii. Solid State Commun. **30**, 13 (1979).
- [3] Э.Л. Нагаев. Физика магнитных полупроводников. Наука. М. (1979); E.L. Nagaev. Physica of Magnetic Semiconductors. Mir. M. (1983).
- [4] E.L. Nagaev. Physica **C 205**, 91 (1993).
- [5] J. Vitins, P. Wachter. Phys. Rev. **B 12**, 3829 (1972); J. Vitins, P. Wachter. Solid State Commun. **13**, 1273 (1973).
- [6] Y. Shapira, S. Foner, N. Oliveira, Jr. Phys. Rev. **B 10**, 4765 (1974).
- [7] N. Oliveira, Jr, S. Foner, Y. Shapira, T. Reed. Phys. Rev. **B 5**, 2105 (1972); Y. Shapira, S. Foner, N. Oliveira, Jr, T. Reed. Phys. Rev. **B 5**, 2647 (1972).
- [8] E.L. Nagaev. From Magnetic Semiconductors to High- T_c Superconductors. Cambridge University Press (1996).
- [9] Э.Л. Нагаев. УФН **165**, 529 (1995).
- [10] R. Balian, C. Bloch. Ann. Phys. **60**, 401 (1970).
- [11] Э.Л. Нагаев, А.И. Подельщиков. ФТТ **23**, 3, 859 (1981).