

ЯВЛЕНИЯ ПЕРЕНОСА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ, СОДЕРЖАЩЕЙ ПРИМЕСИ С ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТЬЮ

Ляпилин И. И., Кулеев И. Г., Карягин В. В.

В рамках модели Андерсона исследуются кинетические явления в КЯ, содержащей примеси с переменной валентностью. Показано, что энергетический спектр зонных носителей вследствие гибридизации s - и d -электронов расщепляется на две или более ветви в зависимости от числа размерно-квантованных уровней энергии, расположенных ниже резонансного уровня железа.

Вычислены плотность электронных состояний и транспортное время релаксации электронов. Показано, что правильный (ступенчатый) характер плотности состояний нарушается в окрестности резонансного уровня железа, в результате чего при высоких концентрациях железа в плотности электронных состояний возникает щель.

В рамках развитой теории вычислена проводимость двумерных электронов в зависимости от температуры и содержания железа в КЯ.

Введение. В последние годы большой интерес вызвала новая группа разбавленных магнитных полупроводников (РМП), в которых магнитным ионом является железо — $A_{1-x}^{II}Fe_xB^{VI}$. Всесторонне изучен лишь один, но, по всей видимости, наиболее интересный представитель этой группы — $Hg_{1-x}Fe_xSe$.

Многочисленные эксперименты (см. обзор [1] и литературу в нем) показывают, что большинство физических свойств РМП $HgFeSe$ определяется положением состояний Fe^{2+} относительно дна зоны проводимости. Ионы Fe^{2+} являются нейтральными донорами, уровни которых расположены в зоне проводимости на расстоянии $\approx 220 \pm 10$ мэВ от ее дна. При концентрации ионов железа $N_d < < 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ все ионы Fe^{2+} автоионизируются, превращаясь в ионы Fe^{3+} . Концентрация свободных электронов при этом $N_e = N_d$. При дальнейшем увеличении концентрации железа только часть доноров оказывается ионизованной. В этом случае возникает смешанная система $3d^5$ - и $3d^6$ -состояний Fe (система ионов с переменной валентностью). Энергия Ферми стабилизируется при этом в окрестности донорного уровня.

Теоретическое объяснение обнаруженных аномальных температурных и концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов в $HgFeSe$ проводилось в рамках модели образования локализованного вигнеровского кристалла [2], которая, несмотря на свою привлекательность, не лишена недостатков [3], заставляющих критически относиться к возможности применения ее для количественной интерпретации экспериментальных данных. Альтернативное объяснение указанных особенностей, без привлечения идеи об образовании вигнеровского кристалла, но с учетом изменения энергетического спектра и затухания электронов проводимости вследствие гибридизации s - и d -электронов при учете фоновых механизмов рассеяния, было сделано в работе [3] на основе модели Андерсона для примесей с переменной валентностью.

Возможность реализации квантовой ямы (КЯ), содержащей двумерные носители заряда и примеси с переменной валентностью, была рассмотрена в работе [4]. Примером такой структуры является $Hg_{1-y}Cd_ySe/Hg_{1-x}Fe_xSe_x/Hg_{1-y}Cd_ySe$ при соответствующем выборе композиционного параметра y . Экспериментально

такая структура может быть получена с использованием техники молекулярно-лучевой эпитаксии.

Здесь мы рассмотрим, в рамках модели [3], явления переноса в КЯ, содержащей примеси Fe: проанализируем спектр и затухание двумерных электронов, вычислим плотность состояний с учетом гибридизации d -уровня с зонными состояниями, а также изучим зависимость проводимости как от содержания железа в КЯ, так и от температуры.

1. Гамильтониан и электронные функции Грина

Исходя из модели Андерсона [5], будем полагать, что иону Fe^{2+} соответствует состояние с двумя d -электронами (d^2), а иону Fe^{3+} — d^1 . Состояние d^0 , соответствующее иону Fe^{4+} , находится по энергии значительно ниже, чем состояния Fe^{2+} , Fe^{3+} , и его в дальнейших расчетах мы учитывать не будем. В этом случае d -состояния примесей железа могут быть заняты только одним или двумя электронами, и переходы типа $d^1 \leftrightarrow d^2$ будут определять энергию d -резонанса $\Omega_0 = \varepsilon_{21} = \varepsilon_d + U$.

Гамильтониан Андерсона для системы двумерных электронов, взаимодействующих с хаотически распределенными d -примесями в терминах операторов изменения атомной конфигурации $X^{a\beta}$ (операторов Хаббарда), может быть записан в виде [6]

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_{dd} + \mathcal{H}_1, \quad \mathcal{H}_s = \sum_{\nu\sigma} \varepsilon_\nu a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}, \quad \mathcal{H}_d = \sum_{\sigma j} [\varepsilon_d (X_j^{\sigma\sigma} + 2X_j^{22})], \\ \mathcal{H}_{dd} &= U \sum_j X_j^{22}, \quad \mathcal{H}_1 = V \sum_{\nu\sigma j} [\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) a_{\nu\sigma}^+ X_j^{0\sigma} + \psi_\nu^*(\mathbf{R}_j, z_j) X_j^{\sigma 0} a_{\nu\sigma} + \\ &\quad + \eta(\sigma) (\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) a_{\nu\sigma}^+ X_j^{-\sigma 2} + \psi_\nu^*(\mathbf{R}_j, z_j) X_j^{2-\sigma} a_{\nu\sigma})], \\ \eta(\sigma) &= \begin{cases} 1, & \sigma = \uparrow \\ -1, & \sigma = \downarrow \end{cases}; \quad X_j^{a\beta} X_j^{\gamma\delta} = \delta_{\beta\gamma} X_j^{a\delta}; \quad X_j^{++} + X_j^{--} + X_j^{22} = 1. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь ε_k — закон дисперсии $2d$ -электронов проводимости, который для простоты мы будем считать квадратичным и изотропным:

$$\begin{aligned} \varepsilon_\nu &= E_{kL} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_L; \quad \mathbf{k} = (k_x, k_y); \quad \mathbf{R} = (x, y); \quad \nu = \mathbf{k}, L, \\ E_L &= E_0 L^2; \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mW_x^2}, \end{aligned} \quad (2)$$

где E_L — энергия размерно-квантованного уровня ($L=1, 2, \dots$) W_x — ширина квантовой ямы, m — эффективная масса электрона.

Без учета гибридизации состояний спектра $\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j)$ — волновые функции квазидвумерных электронов бесконечно глубокой квантовой ямы, имеющие обычный вид

$$\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) = \psi_{kL}(\mathbf{R}_j, z_j) = \frac{1}{(L_x L_y)^{1/2}} \exp(ik\mathbf{R}_j) \Phi_L(z_j). \quad (3)$$

Здесь $\Phi_L(z)$ — огибающая волновая функция:

$$\Phi_L(z) = (2/W_x)^{1/2} \sin(Lz/W_x + L\pi/2); \quad z \in [-W_x/2; W_x/2],$$

V — константа s - d -гибридизации.

Для вычисления спектра электронов и их затухания запишем до третьего порядка по константе гибридизации V уравнения движения для электронных коммутаторных функций Грина [7]:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{aa'}(E + i\varepsilon) \equiv \langle\langle a_{\nu\sigma} | a_{\nu'\sigma'}^+ \rangle\rangle_{E\pm} = - \int_{-\infty}^{\infty} \langle [a_{\nu\sigma}(t), a_{\nu'\sigma'}^+(t)]_+ \rangle \exp [t(iE - \varepsilon)/\hbar]. \quad (4)$$

Расщепление уравнений в третьем порядке по V позволяет правильно найти затухание ветвей гибридизованного спектра и соответственно влияние флуктуации заполнения квазилокальных центров на подвижность носителей тока. В результате получаем цепочку уравнений

$$\begin{aligned} (E - \varepsilon_v) \langle\langle a_{\nu\uparrow} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle &\simeq \hbar\delta_{\nu\nu'} + V \sum_j \psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) \langle\langle X_j^{-2} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle, \\ (E - \Omega_0) \langle\langle X_j^{-2} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle &= V \sum_j \psi_\nu^*(\mathbf{R}_j, z_j) \langle\langle (X_j^- + X_j^{22}) a_{\nu\uparrow} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle - \\ &- V \sum_j \psi_\nu^*(\mathbf{R}_j, z_j) \langle\langle X_j^- a_{\nu\downarrow} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle, \\ (E - \varepsilon_v) \langle\langle X_j^- a_{\nu\downarrow} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle &= [f(\varepsilon_v) - 1] V \psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) \langle\langle X_j^{-2} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь мы провели расщепление

$$\langle\langle a_{\nu\downarrow}^+ a_{\nu'\downarrow} X_j^- | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle \simeq \delta_{\nu\nu'} f(\varepsilon_v) \langle\langle X_j^- | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle,$$

$f(\varepsilon_v)$ — функция распределения двумерных электронов проводимости.

Из цепочки уравнений для функции Грина $G_{\nu\nu'}^\dagger = \langle\langle a_{\nu\uparrow} | a_{\nu'\uparrow}^+ \rangle\rangle$ находим

$$(E - \varepsilon_v) G_{\nu\nu'}^\dagger = \delta_{\nu\nu'} + V^2 \langle X_j^- + X_j^{22} \rangle \sum_{\nu''} G_{\nu\nu''}^\dagger A_{\nu\nu''}, \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} A_{\nu\nu''} &= \sum_j \frac{\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j) \psi_{\nu''}^*(\mathbf{R}_j, z_j)}{E - \Omega_0 - \Sigma_j(E)}, \\ \Sigma_j(E) &= V^2 \sum_l |\psi_\nu(\mathbf{R}_j, z_j)|^2 \frac{2 - f(\varepsilon_v)}{E - \varepsilon_v}. \end{aligned}$$

Здесь $\Sigma_j(E)$ определяет сдвиг и уширение j -го примесного уровня. Так как характерные энергии электронов $E \simeq \Omega_0 \simeq 210$ мэВ, а уширение d -уровня $\simeq 0.1$ мэВ [3], $\gamma_d/\Omega_0 \simeq 10^{-3} - 10^{-4}$, то для упрощения расчета будем считать, что $\Sigma_j(E)$ не зависит от координаты примеси. Это означает, что в (6) мы провели усреднение $\Sigma_j(E)$ по хаотическому распределению примесей:

$$\begin{aligned} \Sigma_j \rightarrow \langle \Sigma_j \rangle &= \Sigma_d = U^2 \sum_\nu \frac{2 - f_\nu}{E - \varepsilon_\nu}, \\ A_{\nu\nu''} &= \frac{N_d \delta_{\nu\nu''}}{L_x L_y} \frac{1}{E - \Omega_0 - \Sigma_d}. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя (7) в (6), окончательно получаем

$$G_{\nu\nu'}^\dagger(E) = \delta_{\nu\nu'} \left[E - \varepsilon_v - \frac{\xi}{E - \Omega_0 - \Sigma_d(E)} \right]^{-1}. \quad (8)$$

Здесь

$$\xi = \frac{N_d V^2}{L_x L_y} \langle X^- + X^{22} \rangle. \quad (9)$$

Выражение (8) не учитывает фоновые механизмы рассеяния $2D$ -электронов. Можно показать [3], что при учете взаимодействия $2D$ -электронов со случайным полем дефектов, описываемым оператором типа $V_{\nu\nu} = \Sigma V_{\nu\nu} a_{\nu\sigma}^+ a_{\nu\sigma}$, где $V_{\nu\nu}$ — матричный элемент взаимодействия электронов проводимости с заря-

женными центрами и нейтральными дефектами, для функции Грина будет справедливо выражение

$$G_{\nu\nu}^{\uparrow}(E) = \delta_{\nu\nu} \left[E - \varepsilon_{\nu} - \Sigma_{\phi}(E) - \frac{\xi}{E - \Omega_0 - \Sigma_d(E)} \right]^{-1}, \quad (10)$$

$$\Sigma_{\phi}(E) = \sum_{\mu} \langle V_{\mu\nu} V_{\nu\mu} \rangle G_{\mu\mu}^{\uparrow}(E).$$

Отметим, что расщепление уравнений (5) во втором порядке по константе $s-d$ -гибридизации [6] позволяет найти перенормированный спектр, а расщепление в третьем порядке позволяет определить затухание ветвей гибриризованного спектра и соответственно влияние флуктуаций заполнения d -центров на подвижность двумерных носителей тока.

2. Влияние d -резонанса на энергетический спектр и плотность состояний электронов проводимости

Спектр и затухание электронов проводимости находятся обычным образом [3] из условия $\{G_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^{\pm}(E)\}^{-1} = 0$:

$$(E - \varepsilon_{\nu} - \Sigma_{\phi}(E))(E - \Omega_0 - \Sigma_d(E)) - \xi = 0, \quad (11)$$

$$\Sigma_{\phi}(E^+) = \Delta_{\phi} - \frac{i}{2} \gamma_{\phi}; \quad \Sigma_d(E^+) = \Delta_d - \frac{i}{2} \gamma_d. \quad (12)$$

При решении уравнения (11) мы пренебрегаем влиянием корреляционных эффектов (эффектом Кондо). Как показано в [3], температура Кондо для HgFeSe из-за малости плотности электронных состояний на уровне Ферми (что обусловлено малостью эффективной массы электронов $m \sim 0.07m_0$ и энергии Ферми $E_F \sim 0.23$ эВ) по сравнению с металлами мала и, согласно [3], $T_K \ll 1$ К. Кроме того, столкновительное уширение электронных состояний, связанное с рассеянием носителей тока на дефектах, должно подавлять кондовские особенности в кинетических коэффициентах, так как $T_{\text{Дингля}} > T_K$ [1]. Для HgFeSe $T_{\text{Дингля}} \sim 1-6$ К. Экспериментальные данные [1] показывают, что «аномалии» в кинетических коэффициентах, наблюдающиеся в HgFeSe при $T \sim 4-100$ К, не связаны с корреляционными эффектами, что в свою очередь является еще одним оправданием сделанного нами предположения.

Оценки, сделанные из подвижности электронов в HgSe и HgFeSe, показывают [3], что $\gamma_{\phi} \sim (0.4-0.6)$ мэВ, $\gamma_d < \gamma_{\phi}$, поэтому в интересующей нас области энергий электронов $E \sim \Omega \sim E_F$ отношение $\gamma_{\phi}/E \sim 10^{-2}-10^{-3}$, что позволяет пренебречь зависимостью величин $\Sigma_{\phi}(E)$ и $\Sigma_d(E)$ от энергии при решении уравнения (11).

Результаты численного анализа энергетического спектра, выполненного по формуле (11), в пренебрежении зависимостями величин $\Sigma_{\phi}(E)$ и $\Sigma_d(E)$ от энергии для КЯ шириной $W_x = 121 \text{ \AA}$, когда в ней реализуются два размерноквантованных уровня энергии ниже d -уровня, представлены на рис. 1.

Как следует из расчетов, вследствие гибриризации s - и d -электронов энергетический спектр $2D$ -электронов проводимости расщепляется на две или более ветвей в зависимости от числа размерно-квантованных энергетических

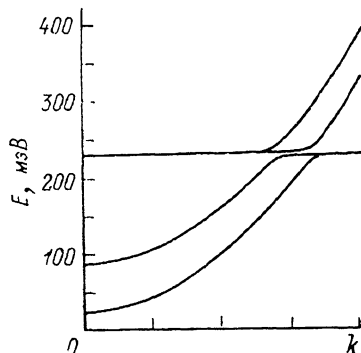


Рис. 1. Энергетический спектр электронов проводимости в КЯ ($W_x = 121 \text{ \AA}$).

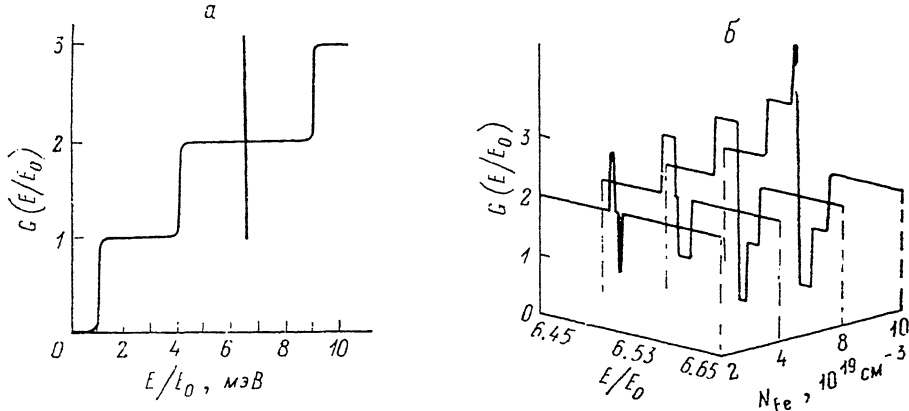


Рис. 2.

Плотность электронных состояний ($W_0=121 \text{ \AA}$, $E_d=210 \text{ мэВ}$, $E_0=32 \text{ мэВ}$) (а), поведение плотности состояний в окрестности резонансного уровня E_d в зависимости от концентрации железа в КЯ (б).

уровней, расположенных ниже уровня железа. Чтобы не усложнять картину гибридных ветвей спектра, изображенных на рис. 1, мы пренебрегли затуханием. При учете затухания (γ_ϕ , γ_d) гибридная щель в спектре носителей тока исчезает, а перенормированная $E(k)$ будет иметь вид кривой аномальной дисперсии при $E \sim \Omega$. Причем область возмущенных ветвей спектра будет ограничена $k_{\min} < k < k_{\max}$. При $N_d \sim (5-10) \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ($-k_{\min} + k_0/k_0$ и $|-k_{\max} - k_0/k_0| \ll 1$ ($\hbar^2 k_0^2/2m = \hbar\Omega$).

Затухание ветвей спектра, как и в трехмерном случае, вдали от d -резонанса определяется фоновыми механизмами рассеяния γ_ϕ , а в окрестности резонанса, где электронные состояния носят d -образный характер, — шириной d -уровня γ_d [3].

Плотность состояний $2D$ -электронов определяется выражением

$$g(E) = -\frac{2}{\pi} \sum \text{Im} G_{\nu\nu'}(E^+). \quad (13)$$

Учитывая (12), из (10) аналогично [3] находим

$$G_{\nu\nu'}^+(E^+) = -\frac{1}{\epsilon_k - \alpha_L(E) - \frac{i}{2}\beta(E)}. \quad (14)$$

Здесь

$$\alpha_L(E) = (E - E_L) - \Delta_\phi - \xi \frac{E - \Omega}{(E - \Omega)^2 + \gamma_d^2/4}, \quad (15)$$

$$\beta(E) \cong \gamma_\phi \frac{(E - \Omega)^2 + \xi\gamma_d/\gamma_\phi}{(E - \Omega)^2 + \xi}. \quad (16)$$

Подставив (14) в (13), найдем плотность состояний для электронов проводимости с учетом гибридизации s - и d -электронов:

$$g(E) = g_0 \sum_L g_L(E); \quad g_L(E) = [1 + 2/\pi \arctg(2\alpha_L(E)/\beta)],$$

$$g_0 = \frac{L_x L_y m}{2\pi \hbar^2}. \quad (17)$$

При $N_d \rightarrow 0$ и $\gamma_\phi \rightarrow 0$ из (15) следует известный результат

$$g(E) = g_0 \sum_L \vartheta(E - E_0 L^2); \quad \vartheta(x) = 1 \text{ при } x > 0 \text{ и } 0, \text{ если } x < 0.$$

Результаты численного анализа плотности электронных состояний представлены на рис. 2. Плотность электронных состояний имеет обычный характер для систем с переменной валентностью: «накачка» состояний (пик плотности состояний) при $E \leq \Omega$ и «выкачка» состояний (минимум плотности состояний) в области $E \geq \Omega$. Однако двухмерность электронного газа приводит к ступенчатому характеру областей накачки и выкачки состояний и обуславливает пороговый характер появления этих дополнительных прямоугольных пиков и минимумов. При высоких концентрациях железа в плотности состояний возникает щель.

Условие реализации дополнительной L -ой ступеньки в плотности состояний в окрестности резонанса может быть представлено в виде для L -го «пика» (область накачки)

$$N_d \geq g(\Omega^-) [E_0 L^2 - \Omega] > 0; \quad E_{\max} = \Omega - \gamma_d/2, \quad (18)$$

а для соответствующего L -го «провала» (область выкачки электронных состояний)

$$N_d \geq g(\Omega^+) [\Omega - E_0 L^2] > 0; \quad \Omega^\pm = \Omega \pm \gamma_d/2. \quad (19)$$

Ширина дополнительных ступенек зависит от концентрации ионов железа и описывается следующими выражениями:

для L -го пика

$$\Delta x^L \simeq \frac{\xi}{E_0 L^2 - \Omega} \left[1 - \frac{\gamma_d^2}{\xi^2} (E_0 L^2 - \Omega)^2 \right]^{1/2}, \quad (20)$$

а для L -го провала

$$\Delta x^L \simeq \frac{\xi}{\Omega - E_0 L^2} \left[1 - \frac{\gamma_d^2}{\xi^2} (\Omega - E_0 L^2)^2 \right]^{1/2}. \quad (21)$$

Анализ показывает, что симметричная картина областей накачки и выкачки состояний имеет место в том случае, когда d -уровень расположен посередине соответствующей ступени в плотности состояний. В противном случае симметричная картина нарушается, возникает дополнительная выкачка или накачка состояний из краев соответствующих подзон, что приводит к их смещению.

3. У р а в н е н и е э л е к т р о н е й т р а л ь н о с т и и ч и с л а з а п о л н е н и я

Для анализа изменения кинетических коэффициентов как функции концентрации примесей железа необходимо определить энергию Ферми из уравнения электронейтральности.

Так как концентрация электронов проводимости определяется концентрацией доноров (Fe^{3+}), расположенных в КЯ, уравнение электронейтральности имеет следующий вид:

$$N_s = W_s N_{\text{Fe}^{3+}} = W_s 2N_d \langle X_j^- \rangle = W_s 2N_d n_1, \\ N_d = N_{\text{Fe}^{3+}} + N_{\text{Fe}^{2+}}. \quad (22)$$

Здесь

$$n_1 = \langle X_j^- \rangle = \langle X_j^+ \rangle. \quad (23)$$

С другой стороны, концентрация $2D$ -электронов в КЯ определяется выражением

$$N_s = \frac{1}{L_x L_y} \int_0^\infty f(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon \simeq \frac{1}{L_x L_y} \int_0^\zeta g(\epsilon) d\epsilon. \quad (24)$$

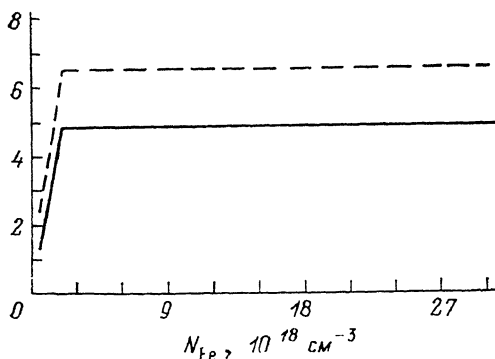


Рис. 3. Зависимость концентрации электронов проводимости $n_e \cdot 10^{-12}$, см^{-2} (сплошная кривая) и энергии Ферми E_F/E_0 мэВ (штриховая) от содержания железа в КЯ ($T=4.2$ К).

Если концентрация железа исчезающе мала ($N_d \rightarrow 0$), то из (23) получаем

$$N_e = \frac{m}{\pi \hbar^2} \sum_L J_L;$$

$$J_L = \int_0^{\zeta} \vartheta(\varepsilon - E_0 L^2) d\varepsilon,$$

$$J_L = \begin{cases} \zeta - E_0 L^2; & \zeta > E_0 L^2, \\ 0; & \zeta < E_0 L^2. \end{cases} \quad (25)$$

Для вычисления чисел заполнения $\langle X^{\alpha\alpha} \rangle$ воспользуемся спектральной теоремой [6]

$$\langle AB \rangle = -1/\pi \int_{-\infty}^{\infty} f(E) \text{Im} \langle\langle B | A \rangle\rangle^{E+} dE. \quad (26)$$

В первом порядке по взаимодействию V имеем

$$\langle\langle X^{-2} | X^{2-} \rangle\rangle^E = \frac{\langle X^{--} + X^{22} \rangle}{E - \Omega_0}; \quad \langle\langle X^{0+} | X^{+0} \rangle\rangle^E = \frac{\langle X^{00} + X^{++} \rangle}{E - \varepsilon_d}. \quad (27)$$

Из (25) и (26) получаем

$$\begin{aligned} \langle X^{22} \rangle &= \langle X^{2-} X^{-2} \rangle = \langle X^{--} + X^{22} \rangle f(\Omega_0), \\ \langle X^{++} \rangle &= \langle X^{+0} X^{0+} \rangle = \langle X^{00} + X^{++} \rangle f(\varepsilon_d). \end{aligned} \quad (28)$$

Введя обозначения $n_0 = \langle X^{00} \rangle$, $n_1 = \langle X^{--} \rangle = \langle X^{++} \rangle$, $n_2 = \langle X^{22} \rangle$, получаем систему уравнений для определения n_α ($\alpha=1, 2, 3$):

$$n_2 = (n_1 + n_2) f(\Omega_0); \quad n_1 = (n_0 + n_1) f(\varepsilon_d); \quad n_0 + 2n_1 + n_2 = 1. \quad (29)$$

Заметим, что последнее уравнение системы (29) есть условие нормировки для X — операторов Хаббарда [4]. Из (29) находим

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{1 + e^{-(\varepsilon_d - \zeta)/kT} + e^{-(2\varepsilon_d + U - 2\zeta)/kT}}, \\ n_1 &= n_0 e^{-(\varepsilon_d - \zeta)/kT}; \quad n_2 = n_0 e^{-(2\varepsilon_d + U - 2\zeta)/kT}. \end{aligned} \quad (30)$$

Зависимости энергии Ферми ζ (N_d) и концентрации электронов проводимости N_e (рис. 3) в КЯ, как и для объемных кристаллов, показывают стабилизацию уровня Ферми ξ и концентрации электронов проводимости N_e (N_d) в окрестности резонансного донорного уровня при $N_d > N_d^*$ ($N_d^* = 2.3 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$).

4. Вычисление электропроводности

Для вычисления электропроводности воспользуемся формулой Кубо [8]:

$$\sigma_{\perp} = \sigma_{ii} = -\pi \hbar e^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} J_i(\varepsilon); \quad i = x, y, \quad (31)$$

где

$$J_i(\varepsilon) = \sum_{1,2} V_{12}^i V_{21}^i \delta(\varepsilon - \varepsilon_1) \delta(\varepsilon - \varepsilon_2).$$

Вычисляя матричные элементы оператора скорости V_{12} на волновых функциях (3), для σ получаем

$$\sigma_{\perp} = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \sigma(\varepsilon), \quad (32)$$

где

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2}{m L_x L_y} \tau(\varepsilon) \sum_L \left\{ \alpha_L(\varepsilon) g_L(\varepsilon) + \frac{\hbar g_0}{2\pi\tau(\varepsilon)} \right\}. \quad (33)$$

Здесь $\tau(\varepsilon)$ — время жизни, которое выражается через столкновительную ширину одночастичных состояний: $\tau(\varepsilon) = \hbar/\Gamma(E)$. Явное выражение для $\Gamma(E)$ в широком интервале изменения параметров γ_{ϕ} , γ_d и ξ было получено в работе [3] и имеет следующий вид:

$$\Gamma(E) \cong \gamma_{\phi} \frac{(E - \Omega)^2 + \xi \gamma_d(E)/\gamma_{\phi}(E)}{(E - \Omega)^2 + \xi}. \quad (34)$$

Зависимости проводимости $\sigma(N_d)$ от температуры, вычисленные согласно формуле (32), представлены на рис. 4. Возрастание проводимости при увеличении концентрации железа в КЯ при $N_d > N_d^*$ обусловлено немонотонной зависимостью $\tau(E)$: $\Gamma(E)$ при $\gamma_d < \gamma_{\phi}$ имеет минимум, а $\tau(E)$ — максимум при $E = \Omega$. При этом $\sigma_{\max}(N_d)/\gamma_{\phi} \sim \gamma_{\phi}/\gamma_d$. С ростом температуры $\sigma_{\max}(N_d)$ уменьшается вследствие того, что в проводимость вносит вклад все большее число электронов, время релаксации которых определяется фоновыми механизмами

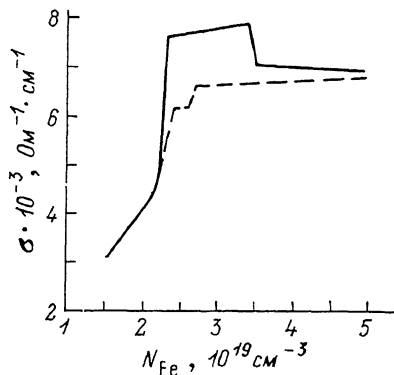
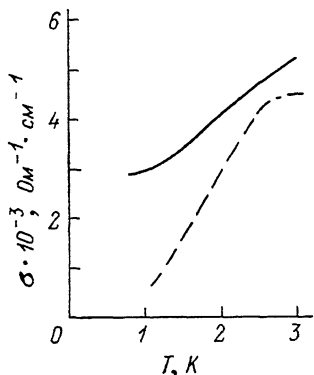


Рис. 4. Зависимость проводимости электронов от температуры при различных концентрациях железа в КЯ.

N_{Fe} , cm^{-3} : сплошная кривая — $3 \cdot 10^{19}$, штриховая — $6 \cdot 10^{19}$.

Рис. 5. Зависимость проводимости электронов от концентрации примесей железа при различных температурах.

T , К: сплошная кривая — 1, штриховая — 10.

рассеяния. Зависимости проводимости $\sigma(T)$ от концентрации примеси железа приведены на рис. 5. Заметим, что при $N_d > N_d^*$ $\sigma(T) \rightarrow 0$ при уменьшении температуры, что обусловлено наличием щели в плотности электронных состояний при $E = \Omega$.

Заключение. Таким образом, проведенные расчеты энергетического спектра, плотности электронных состояний и проводимости двумерных носителей в КЯ с примесями переменной валентности, выполненные в рамках модели Андерсона, показали, что гибридизация зонных и локализованных электронов, как и в объемных кристаллах HgFeSe, должна приводить к широкому многообразию интересных физических явлений и особенностей как в кинетических, так и в термодинамических свойствах этих соединений при низких температурах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Пидильковский И. М. // ФТП. 1990. Т. 24. В. 4. С. 593—609.
- [2] Mycielski A. // J. Appl. Phys. 1988. V. 63. N 8. P. 3279—3284.
- [3] Кулеев И. И., Ляпилин И. И., Карягин В. В. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. В. 1. С. 172—183.
- [4] Ortenberg M., Portugall O., Dobrowolski W., Mycielski A., Calazka R., Herlach F. // J. Phys. C: Sol. St. Phys. 1988. V. 21. N 1. P. 5393.
- [5] Anderson P. W. // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 141.
- [6] Кузьмин Е. В., Петраковский Г. А., Завадский Э. А. Физика магнитоупорядоченных веществ. М., 1976. 350 с.
- [7] Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1965. 336 с.
- [8] Kubo R., Miyake J., Hashitsume H. // Sol. St. Phys. 1965. V. 17. P. 269.

Институт физики металлов
УрО РАН
Свердловск

Получена 22.07.1991
Принята к печати 21.08.1991

