

强磁场下 n 型 InSb 杂质带及其电导的理论

黄 敏

(北京工业学院工程光学系)

韩 汝 琦

(北京大学计算机系)

甘 子 刀

(北京大学物理系)

1984年11月12日收到

利用前人关于超强磁场下原子谱的理论结果，构造了强磁场下 n-InSb 中电子运动的哈密顿量，用构形平均方法计算了杂质带的零级谱、零级态密度函数以及体系发生 Anderson 转变的条件。计算结果和实验基本符合。

无序系统的金属-非金属转变是当代固体理论中引人注目的研究领域。掺杂半导体的杂质电导是上述领域中的重要课题。实际上，无序系统的电子理论就是从研究半导体杂质电导开始的^[1]。

不少作者分析过零磁场下改变掺杂浓度和补偿度时低温电导率及其温度依赖关系的变化，通过理论与实验的比较，得到了许多有关杂质带及其电导中 Anderson 转变的认识^[2]。

1975年 Ferre^[3] 等人报告了强磁场下 n-InSb 材料杂质电导的金属-非金属转变的实验结果，立即引起了人们的注意。不少人开展了实验和理论工作^[4]。

强磁场可以使杂质波函数发生明显变化，例如收缩效应^[5,6]，利用这些效应可用强磁场改变杂质带的带宽、迁移率边 E_c 的位置等。由于在实验中磁场是可以连续、准确地调节的，因而与掺杂浓度、补偿度等参量相比有很大的优越性。

低温强磁场下杂质电导的实验目前主要集中在 n-InSb 材料。主要是因为 InSb 导带电子的有效质量很小 ($m_e^* = 0.013$ 电子质量)，介电常数很大 ($K = 17.88$)，而这使强磁场条件很容易实现。对 n-InSb 来说，强磁场条件为磁场达到 10^3 G，作为对比，n-Si 的相应值为 10^7 G 以上。InSb 材料导带的极小在 $k = 0$ ，而且带底附近能带是各向同性的。所以在有效质量近似下，施主电子态的理论处理和氢原子、氢负离子在真空、强磁场下的理论形式上很相似。自从 Yafat^[7] 等人提出计算强磁场中氢原子态的绝热近似思想以来，许多作者^[8-14]在这一基础上对氢原子、氢负离子进行了研究，本文在建立理论模型时利用了这些结果。

尽管对低温强磁场下 n-InSb 杂质电导作了不少实验和理论工作，但目前对这个问题

题的理论分析还是很不完整的。本文从单粒子的模型哈密顿量出发讨论了上、下 Hubbard 带的零级谱，在仅考虑对角无序的情况下讨论 Anderson 转变条件，并和实验进行了对比。

一、理 论 模 型

本节以施主杂质电子的单中心杂质态为基，建立了二次量子化形式的杂质态电子运动的模型哈密顿量。然后讨论了构形平均得到的零级哈密顿量及其谱。为下节的讨论打下了基础。

1. 强磁场下 InSb 单施主中心能量本征态

首先我们讨论单中心的施主电子能量本征态。为讨论方便，我们取杂质中心为坐标原点，即 $\mathbf{R}_{\text{imp}} = 0$ 。

(1) 单中心中性施主能量本征态 D^0

设均匀磁场 \mathbf{B} 沿坐标 Z 轴方向，取矢势为 $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ 。在有效质量近似下，由于

InSb 导带在 $\mathbf{k} = 0$ 处为极小并且在这附近各向同性，杂质态的包络函数 $\varphi(\mathbf{r})$ 满足方程

$$\left[\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{K_r} - g \frac{4\hbar^2}{m_0 c^2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \right] \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

我们采用“等效原子单位”，即以 $R_Y^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 K^2}$ 作为能量单位，以 $a_B^* = \frac{\hbar^2 K}{m^* c^2}$ 作为长度单位。在这一单位制下写出单杂质中心 D^0 电子态的方程和原子单位中的真空中氢原子的方程有完全相同的形式。不考虑电子自旋，取柱坐标，方程 (2.1) 可写成。

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial Z^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 - \frac{Z}{\sqrt{\rho^2 + Z^2}} \right] \\ & \times \varphi(\rho, \varphi, Z) = E \varphi(\rho, \varphi, Z), \end{aligned} \quad (2.2)$$

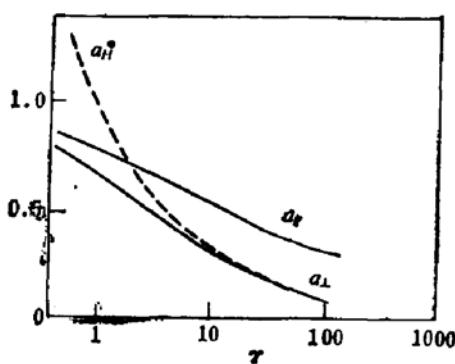
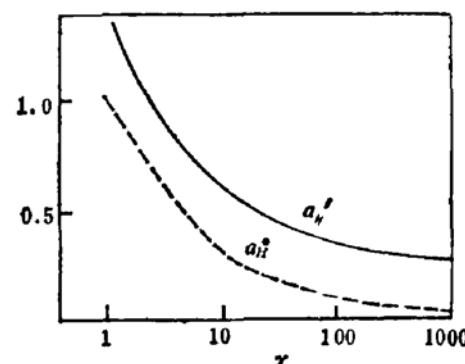
这里 $\gamma \equiv \frac{1}{2} \hbar \omega / R_Y^* = B / B_0 \left(\omega = \frac{e B}{m^* c} \right)$ ， B_0 对 n-InSb 约为 1200G。

在 $\gamma \gg 1$ 的强磁场条件下，仿照 Yafat 等人对氢原子的讨论^[3]，将 (2.2) 的基态和第一激发态的空间波函数写成

$$\varphi_{0,0,0}(\rho, \varphi, Z) = (Z^{3/2} \pi^{3/2} a_1^2 a_{\parallel})^{-1/2} \exp \left[-\frac{\rho^2}{4a_1^2} - \frac{Z^2}{4a_{\parallel}^2} \right], \quad (2.3)$$

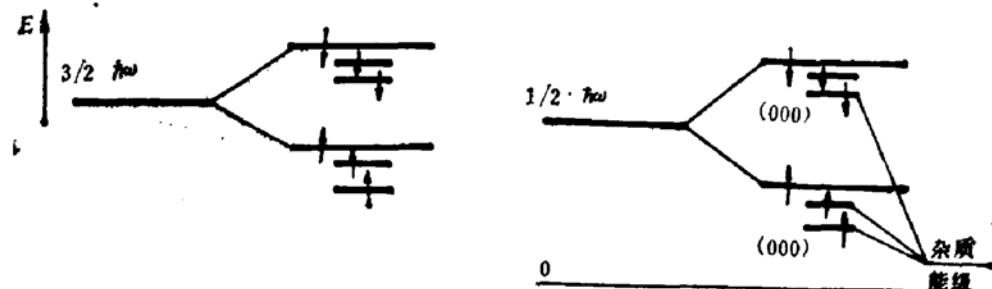
$$\begin{aligned} \varphi_{0,-1,0}(\rho, \varphi, Z) = & (Z^{3/2} \pi^{3/2} a_H^{*2} a_{\parallel}' \cdot 2a_H^{*2})^{-1/2} \rho e^{-i\varphi} \\ & \times \exp \left[-\frac{\rho^2}{4a_H^{*2}} - \frac{Z^2}{4a_{\parallel}'^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

其中 $a_H^* = \sqrt{\hbar c/eB}$ 为电子在磁场下的等效回转半径。基态和第一激发态的自旋是互相平行的。我们对 (2.3)、(2.4) 中的变分参数 a_1 , a_{\parallel} , a_{\parallel}' 进行了变分计算。这是在微型机上用二分法进行的，结果如图 1 和图 2。

图1 a_{\perp}, a_{\parallel} 随 γ 变化的计算值图2 a_{\parallel}' 随 γ 变化的计算值

(2) 单中心负施主离子基态 D^-

在 Hartree-Fock 近似下, 如果没有磁场, 电子能量对自旋是简并的。 D^- 的基态中两电子态是选其处于能量最低的空间波函数上, 而自旋相反。

图3 等效 g 因子引起的能级分裂

在强磁场下, n-InSb 导带电子的等效 g 因子很大^[7](在 $k = 0$ 附近 $g \approx -50$), 这使得自旋不同的 $\varphi_{0,0,0}\uparrow$ 和 $\varphi_{0,0,0}\downarrow$ 态之间能量差远比 $\varphi_{0,0,0}\uparrow$ 和 $\varphi_{0,-1,0}\uparrow$ 之间的能量差大得多(如图 3)。基于这种考虑, 在 Hartree-Fock 近似下强磁场中 D^- 基态应选取两电子自旋方向与磁场相同而空间波函数分别取最低的两个能量状态 $\varphi_{0,0,0}$ 和 $\varphi_{0,-1,0}$ 。同样可以仿照 Menller^[9] 和 Virtamo^[13] 对 H^- 的计算估计这一近似在我们的讨论中引入的误差为 0.01 MeV 量级。

2. 磁场中的施主杂质系统

(1) 在讨论杂质系统的哈密顿量时, 首先应考虑杂质中心不在坐标原点时的杂质波函数和前面考虑过的 $R_{imp} = 0$ 的杂质波函数间的关系。

当 $R_{imp} = 0$ 时, 单中心电子态哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \frac{e^2}{K_r}, \quad (2.5)$$

$R_{imp} \neq 0$ 时

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 - \frac{e^2}{K|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{imp}|}, \quad (2.6)$$

作变量替换 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{imp}}$, (2.6) 变成

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_{\text{imp}} \right)^2 - \frac{e^2}{K_r}, \quad (2.7)$$

和 (2.5) 相比多出一项规范变换因子 $\frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_{\text{imp}}$ 。按量子力学基本原理 (在我们的情况, 波函数对能量不简并), (2.5) 和 (2.7) 属于相同能量本征值的波函数除宗量 $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{imp}}$ 外, 还相差一个相因子 $\exp \left(-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{r} \right)$ 。以 $\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r})$ 为例, 中心移至 $\mathbf{R}_{\text{imp}} \neq 0$ 后, 属于相同本征值的态变成

$$\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r}) \exp \left(-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_{\text{imp}} \cdot \mathbf{r} \right) \quad (2.8)$$

(2) 杂质态电子体系的二次量子化哈密顿量

考虑电子间相互作用, 在坐标表象下的杂质系统哈密顿量可写成

$$\hat{H} = \sum_i \left[\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p}_i + \frac{e}{c} \mathbf{A}_i \right)^2 + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{i < j} \frac{e^2}{K |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (2.9)$$

以 $\{\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \times \exp \left(-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_i \cdot \mathbf{r} \right), \varphi_{0,-1,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \exp \left(-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times \mathbf{R}_i \cdot \mathbf{r} \right)\}$
 $i = 1, 2, 3, \dots, N \quad (2.10)$

为基, 定义基态 $|0\rangle$ 为每个杂质中心上束缚着一个 $\varphi_{0,0,0}$ 电子所形成的状态。如果在某一中心 i 上添加一个处于 $\varphi_{0,-1,0}$ 的电子, 即在中心 i 上形成了一个 D^- 态, 我们说体系中产生了一个“电子”, 态记为 $e_i^\dagger |0\rangle$, e_i^\dagger 为中心 i 处“电子”的产生算符, “电子”运动的能谱即上 Hubbard 带。相应地, 在基态下从中心 i 上将 $\varphi_{0,0,0}$ 电子取走, 我们说体系中产生了一个“空穴”, 这时体系的态记为 $h_i^\dagger |0\rangle$, h_i^\dagger 为中心 i 处“空穴”的产生算符, “空穴”运动的能谱即下 Hubbard 带。相应地可以定义“电子”, “空穴”的湮灭算符 e_i 和 h_i , 它们都是 Fermi 算符。

在“电子”、“空穴”都很少的情况下, 不考虑它们之间的相互作用能, 单粒子哈密顿量可写成

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_h \quad (2.11)$$

$$\hat{H}_e = \sum_i \left(\epsilon_i^e e_i^\dagger e_i + \sum_{j \neq i} V_{ij}^e e_i^\dagger e_j \right) \quad (2.12)$$

其中

$$\begin{aligned} \epsilon_i^e = & \int \varphi_{0,-1,0}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 + V_{\text{imp}}(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. + \sum_l \int |\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l)|^2 \frac{e^2}{K |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \varphi_{0,-1,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

这里考虑了各中心上的 $\varphi_{0,0,0}$ 电子对 $\varphi_{0,-1,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ 电子的直接库仑作用, 非直接的库仑作用我们将它忽略。

$$V_{ij}^e = \int \varphi_{0,-1,0}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[V(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{K |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} \right]$$

$$+ \sum_i \int |\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i)|^2 \frac{e^2}{K|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \left[\varphi_{0,-1,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \right. \\ \cdot \exp \left(-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \cdot \mathbf{r} \right) d\mathbf{r}. \quad (2.14)$$

相似地

$$\hat{H}_h = - \sum_i \left(\epsilon_i^h h_i^\dagger h_i + \sum_{j \neq i} V_{ij}^h h_i^\dagger h_j \right) \quad (2.15)$$

$$\epsilon_i^h = \int \varphi_{0,0,0}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \sum_{l \neq i} \int |\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l)|^2 \frac{e^2}{K|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \varphi_{0,0,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}, \quad (2.16)$$

$$V_{ij}^h = \int \varphi_{0,0,0}^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{2c} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \frac{e^2}{K|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|} + \sum_{l \neq i,j} \int |\varphi_{0,0,0}(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_l)|^2 \frac{e^2}{K|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \\ \times \varphi_{0,0,0}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp \left[-\frac{ie}{2\hbar c} \mathbf{B} \times (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \times \mathbf{r} \right] d\mathbf{r} \quad (2.17)$$

我们注意到(2.12)和(2.15)和晶体中电子的紧束缚哈密顿量在形式上很相似,但它们的对角元和非对角元都和位置有关,而且是无序的,这给我们求解带来了困难。

为了研究上、下 Hubbard 带,下面我们定义了一种构形平均的方法,用以构造出零级哈密顿量,它与简单立方晶格中紧束缚哈密顿量有类似形式。

(3) 构形平均

我们希望平均后的单粒子哈密顿量中对角元都是一样的。而且对每个对角元都有 6 个近邻非对角元。为了使体系由于磁场引起的各向异性得以保留,我们让其中两个平均非对角元反映沿磁场方向(即 Z 方向)排列的杂质中心之间的相互作用的贡献,称为纵向平均非对角元,记为 $V(001)$ 和 $V(00\bar{1})$ 。另外四个反映垂直于磁场方向(即 X, Y 方向)的非对角元的贡献,称为横向非对角元,记为 $V(010)$, $V(0\bar{1}0)$, $V(100)$, $V(\bar{1}00)$ 。

对角元的平均是简单的,我们将各对角元的值相加后除以它们的个数 N_D 。可近似认为这一平均值就是对应单中心态的能量。选 $|0\rangle$ 态的能量为 0, 则有

$$\begin{aligned} \overline{\epsilon_i^h} &= E(D^-) - E(D^0) \\ \overline{\epsilon_i^h} &= E(D^0) \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad (2.18)$$

对于非对角元,情况稍复杂一些。从每个杂质来看,其周围的其他杂质都是无规分布的。我们必须明确规定哪些近邻杂质间的作用对纵向平均非对角元有贡献,哪些对横向平均非对角元有贡献。

设杂质在样品中按 Poisson 分布,那么,在任一指定杂质 i 周围其他杂质出现的概率密度 $n(R)$ 与离杂质 i 的距离 R 的关系为

$$n(R) = n_D \left(1 - e^{-\frac{4\pi}{3} R^3 n_D} \right)$$

作一个以杂质 i 为中心,半径为 R_0 的球,使球内平均含 6 个杂质(中心杂质除外),即

$\int_0^{R_0} n(R) dR = 6$. 半径 $R_0 = 1.19 a_B^* n_D^{-1/3}$. 计算近邻平均非角元时我们就考虑球内杂质的贡献. 下面我们进一步把球分成六个体积相等的区域: 使杂质处于这些区域时分别对纵向平均非对角元 $V(001)$ 和 $V(00\bar{1})$ 、横向平均非对角元 $V(0\bar{1}0)$ 、 $V(010)$ 、 $V(100)$ 、 $V(\bar{1}00)$ 有贡献. 区域作法如图 4. 图中两对顶锥体都张 $1/6$ 球面角, 并和相应球冠围成体积为 $1/6$ 球体积. 这两个区域中的杂质对纵向平均非对角元有贡献. 球体其余部分用两个过球心, 平行于磁场 B 且互相垂直的平面分割成四等分. 这四等分所张立体角亦为 $1/6$ 球面角, 和球冠围成体积为 $1/6$ 球体积. 在这四个区域平均后得到的非对角元为四个横向平均非对角元.

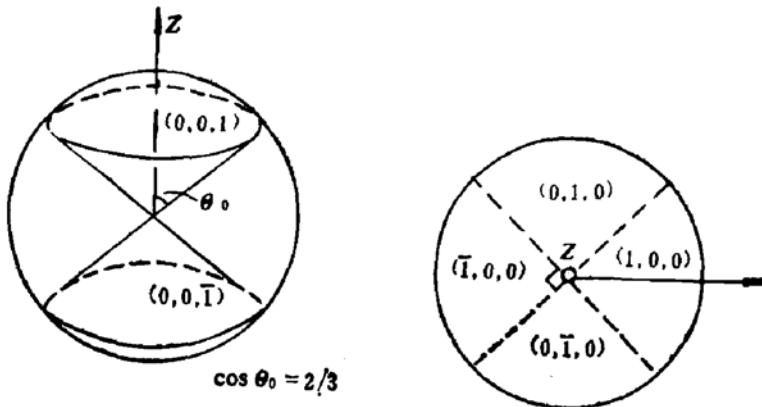


图 4 球内区域划分示意

从对称性看出我们只须计算 $V(001)$ 和 $V(100)$, 因为 4 个横向平均非对角元之间, 两个纵向平均非对角元之间是相等的. 以杂质 i 所在位置为原点建立球坐标 (R, θ, ϕ) , Z 轴平行于磁场方向, 由于 $V(R, \theta, \phi)$ 实际上和 ϕ 无关, 对于 Hubbard 带我们有

$$V^h(001) = \int_0^{R_0} R^2 dR \int_0^{\theta_0} \sin \theta d\theta n(R) 2\pi V^h(\theta, R), \quad (2.19)$$

$$V^h(100) = \int_0^{R_0} R^2 dR \int_0^{\theta_0} 2 \sin \theta d\theta n(R) \frac{\pi}{2} V^h(\theta, R) \quad (2.20)$$

对于上 Hubbard 带, 我们只须将上标“ h ”换成“ c ”即可.

将上述平均结果作为零级 \hat{H} 的对角元和非对角元, 写出

$$\begin{aligned} \hat{H}_h^{(0)} &= - \sum_i \left(\overline{e^h} h_i^+ h_i + \sum_{\sigma} V^h(\sigma) h_i^+ h_{i+\sigma} \right) \\ \hat{H}_c^{(0)} &= + \sum_i \left(\overline{e^c} e_i^+ e_i + \sum_{\sigma} V^c(\sigma) e_i^+ e_{i+\sigma} \right) \end{aligned} \quad (2.21)$$

其中 σ 取六个近邻方向 (001) 、 $(00\bar{1})$ 、 (100) 、 $(\bar{1}00)$ 、 (010) 、 $(0\bar{1}0)$. 这两个哈密顿量和一般紧束缚的二次量子化哈密顿量的区别仅在于非对角元是各向异性的. 我们用处理晶体中紧束缚系统的方法, 取近似波函数

$$\begin{aligned} e_k^{\pm}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_D}} \sum_i e^{-ik \cdot R_i} e_i^{\pm}|0\rangle \\ h_k^{\pm}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_D}} \sum_i e^{-ik \cdot R_i} h_i^{\pm}|0\rangle \end{aligned} \quad (2.22)$$

得到0级谱。忽略计算时非对角元出现的很小的虚部，我们直接用平均非对角元记号记它们的实部，得到

$$\left. \begin{aligned} E_c^{(0)}(\mathbf{k}) &= 2V^c(001)\cos k_z\bar{Z} + 2V^c(100) \\ &\quad \times (\cos k_x\bar{X} + \cos k_y\bar{Y}) \\ E_h^{(0)}(\mathbf{k}) &= 2V^h(001)\cos k_z\bar{Z} + 2V^h(100) \\ &\quad \times (\cos k_x\bar{X} + \cos k_y\bar{Y}) \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

对应带宽为

$$\left. \begin{aligned} B_c^{(0)} &= 4V^c(001) + 8V^c(100) \\ B_h^{(0)} &= 4V^h(001) + 8V^h(100) \end{aligned} \right\} \quad (2.24)$$

本文在上述讨论的基础上进行了计算，下节给出了计算结果。

二、计算结果

计算是在北大6912机和中科院物理所的IBM370机上进行的。

1. 不同浓度时上、下 Hubbard 带中心位置和宽度随磁场的变化

带中心位置即平均对角元能量值。由(2.24)我们计算了不同浓度和磁场下的带宽，这里杂质浓度用 $(a_B^*)^{-3}$ 为单位。它和以 cm^{-3} 为单位的浓度值的对比如表3。计算结果如图5所示，图中纵坐标为电子电离能，横坐标为表征磁场强度的参量 $\gamma = \frac{B}{B_0}$ ，图中虚线

为带中心位置，实线标出了上、下 Hubbard 带的上、下限位置。可以看出，浓度减小时，带宽随之减小，这和零场情况相似，是由于杂质间平均距离增大而使重迭积分——非对角元减小的缘故。带宽随磁场增加而减小，除了单中心波函数在强磁场下横向被压缩外，还有积分(2.14)和(2.17)中超范变换引起的相因子也会使重迭积分减小。

对于n-InSb杂质带的研究，使用磁场是必要的，在一般n-InSb样品掺杂浓度(10^{14}cm^{-3})时，下 Hubbard 和导带在零场下是严重交迭的，而强磁场可使杂质带与导带

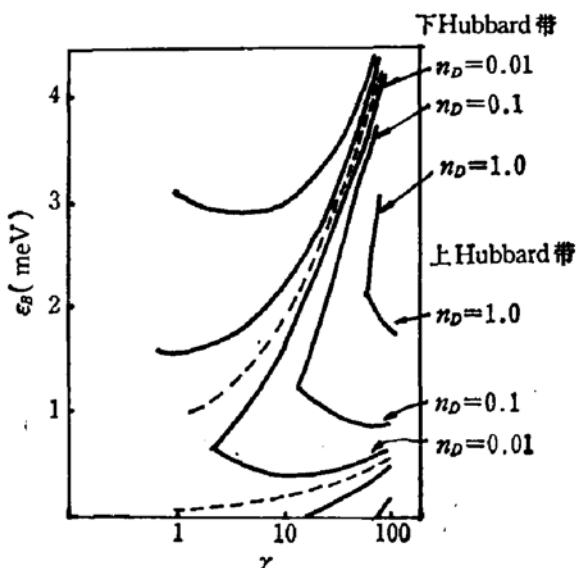


图5 杂质带范围

分开。

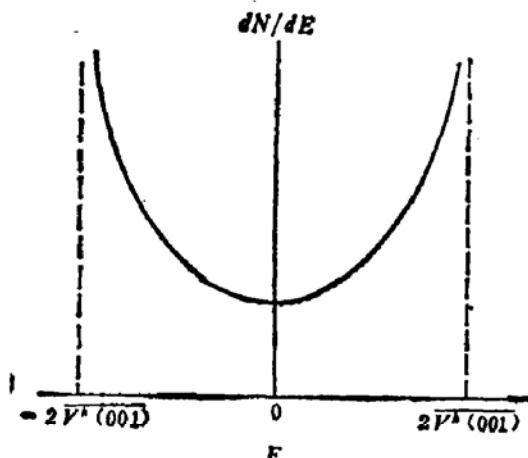


图 6 一维紧束缚态密度函数

2. 态密度函数

从零级谱(2.23)可得到零级态密度函数 dN/dE 。由于单中心波函数本身的各向异性和非对角元积分中相因子的影响，磁场足够强时会出现

|横向平均非对角元| ≪ |纵向平均非对角元| 的情况。

以空穴带为例，当

$$|V^h(001)| \gg |V^h(100)| \quad (3.1)$$

时，如果完全忽略 $V^h(100)$ ，我们得到一个一维紧束缚系统的谱。

$$E_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{k}) = 2V(001)\cos k_z \bar{Z}. \quad (3.2)$$

对应态密度很容易计算

$$\frac{dN}{dE} = \left| \frac{\text{const.}}{\sin k_z \bar{Z}} \right| = \left| \frac{\text{const.}}{\sqrt{[2V(001)]^2 - [E_{\vec{k}}^{(0)}(\vec{k})]^2}} \right|. \quad (3.3)$$

形状如图 6，带中心处态密度相对很小——出现一个赝隙。赝隙的存在对电导可能有很大影响，这一点下一节将会讨论。

定义

$$S = \frac{|V^h(001)|}{|V^h(100)|}, \quad (3.4)$$

我们计算了不同 S 值下的态密度，结果如图 7。从图中可见 S 值愈大，赝隙愈深。对一定浓度 n_D 的样品， S 随磁场增大。值得注意的是，这里赝隙的出现是在单粒子谱中的。

3. 下 Hubbard 带中的 Anderson 局域在临界条件的计算，对角无序的简化考虑

在前节的零级谱中我们没考虑(2.12)和(2.15)中各矩阵元的无规涨落。这里我们简单讨论一下对角无序对 Anderson 局域化的影响，按照 Anderson 理论，当 $\frac{W}{B} \geq 2.7$ 时会

使带中全部态局域化。其中 W 表示哈密顿量中对角元的涨落宽度， B 表示不考虑无序时杂质带的宽度，即零级带宽，已经在前面计算过了。下面讨论一下 W 的值随掺杂浓度、补偿度和磁场的变化。我们的计算只对下 Hubbard 带进行，上 Hubbard 带的计算是类似的。

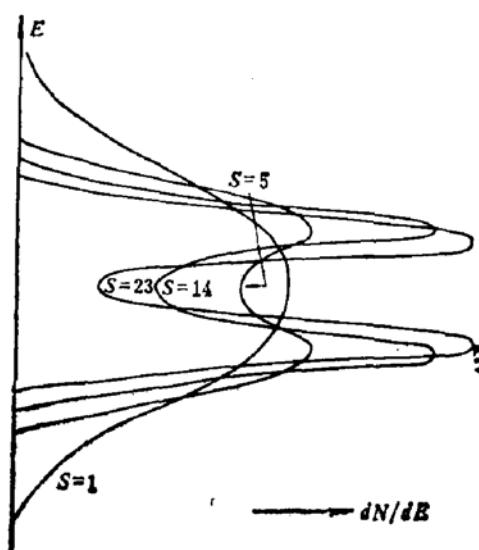


图 7 态密度随 S 值变化的计算结果
—— dN/dE

能量涨落 W 由三个部分贡献: a. 空施主, 可等效于一个正电中心。b. 满受主, 它可等效于一个负电中心。在低温下数目和 a. 的相等, 为 $KN_D = N_A$ 个。c. 满施主, 它是束缚了一个 $\varphi_{0,0,0}$ 电子的杂质中心。低温下有 $(1 - K)N_D$ 个。其中 a 和 b 的贡献由 Mott 和 Twose^[15] 计算过, $W_1 = \frac{2 \times 8.5}{r_s}$

(R_Y^*) , 这里 $r_s = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n_D}}$ 为杂质间平均距离; 而 c 的贡献 W_0 由 Jog 和 Wallace^[16,17] 考虑磁冻结法 (freeze-out) 时考虑过, 这一部分随磁场有微小变化。总的涨落宽度可认为是两部分之和 $W = W_1 + W_0$ 。图 8 绘出了 $r = 20$ 时的 $K \sim W$ 曲线。

运用上面的结果, 得出了 Anderson 局域化的条件, 结果如图 9。图中横坐标为磁场强度, 用 γ 和 kG 两种单位标出。纵坐标为施主浓度, 也用 cm^{-3} 和 $(a_B^*)^{-3}$ 两种单位标出。图中曲线上的点是发生 Anderson 局域化所需的 n_D 和 B 值, 不同曲线对应不同的补偿度。

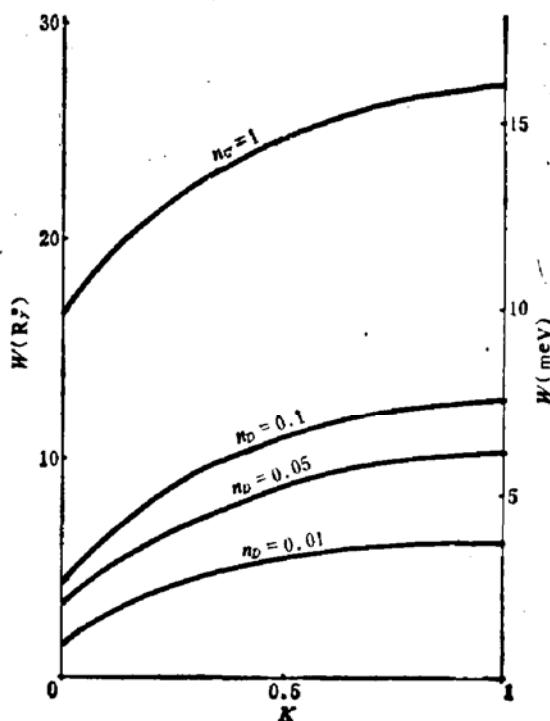


图 8 $r = 20$ 时的 $K \sim W$ 关系

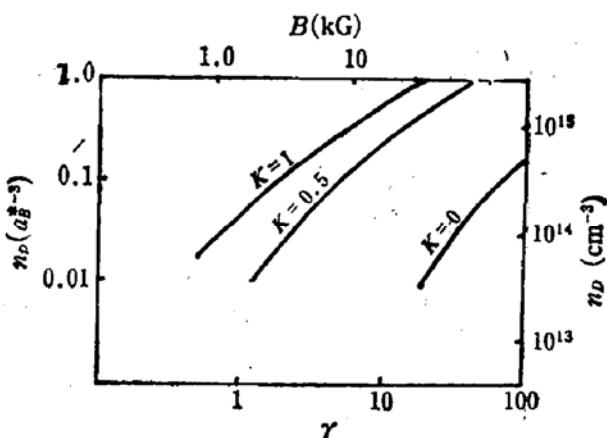


图 9 Anderson 局域化条件

三、对现有实验结果的一些讨论

1. 激活能 ϵ_1 和 ϵ_2

ϵ_1 和 ϵ_2 分别为一个电子从下 Hubbard 带激发到导带和上 Hubbard 带扩展态能区参加导电所需能量。

1975 年 Ferre 测量了 1.6—2.4K 温区范围内磁场为 0—5T 条件下的激活能 ϵ_1 和 ϵ_2 , 结果如图 12 的实线。可见 ϵ_1 和 ϵ_2 极其接近。按本文计算结果, 在实验所涉及的施主浓度

和磁场下，其中 $n_D = 1.25 \times 10^{14}$ 和 $3.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 的样品的上 Hubbard 带和导带有分离的情况，但实际上很多高激发态和由于无序形成的带尾也会使能谱上的隙不存在。所以带间激活能只有一个，我们称其为 ϵ ：它对应于从下 Hubbard 带的费米面激发到作为导带带尾的零级上 Hubbard 带底所需能量。计算结果在图 10 中用虚线标出。可见理论和实验符合得相当好。

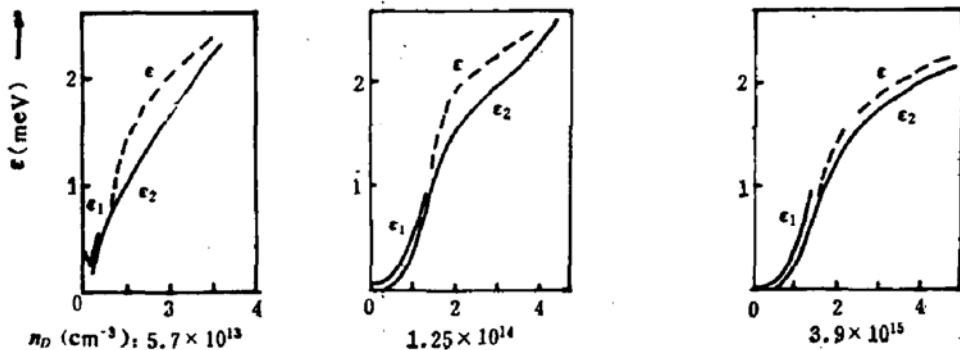


图 10 ϵ 的理论值与实验结果比较。

2. Anderson 转变

1982 年 Tokumoto 和 Mansfield^[4] 测量了 $T \lesssim 0.3 \text{ K}$ 下强磁场中 n-InSb 电导。在这个温区中的电导是由下 Hubbard 带中电子贡献的。图 13 给出了实验结果。各样品对应于磁场值最低的电阻值基本上不依赖于温度，是金属型导电。随着磁场增加，电阻的值愈来愈大，随温度的依赖也愈来愈严重，是非金属型导电。实验所用样品补偿适中， E_F 基本

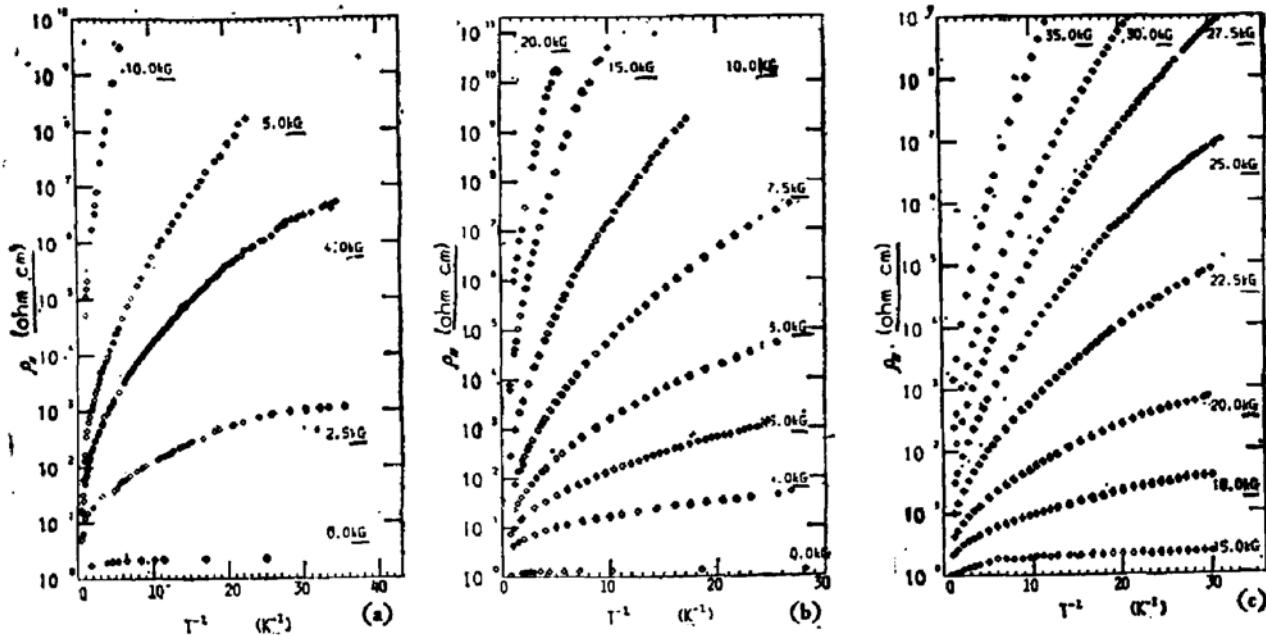


图 11 临界磁场计算结果与实验比较

施主浓度	$1.71 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
补偿比	0.63
理论临界磁场值 H_c	$2.4 \text{ kG} (\gamma_c=2)$

(a) 6313 号样品	$1.71 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(b) 1514 号样品	$4.30 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(c) 1015 号样品	$1.56 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

(a) 6313 号样品	$1.71 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(b) 1514 号样品	$4.30 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(c) 1015 号样品	$1.56 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

(a) 6313 号样品	$1.71 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(b) 1514 号样品	$4.30 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(c) 1015 号样品	$1.56 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

(a) 6313 号样品	$1.71 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(b) 1514 号样品	$4.30 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$
(c) 1015 号样品	$1.56 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

位于下 Hubbard 带带中, 这样需整个带局域时才能使电导变成非金属型的。按上述估计和第三节计算结果, 图 11 下面给出了相应的临界磁场的估算值。可看出基本与实验符合。仔细分析应考虑到态密度形状, 求出 E_F 位置后进行计算。

3. 腋隙存在讨论

在极低温下, 当 E_F 处于局域能区时, 会发生变程跳跃导电, 电导与温度依赖关系可写成 $\sigma = \sigma_0 \exp \left[-\left(\frac{T_0}{T}\right)^x \right]$, 其中 x 为一常数。

Tokumoto 和 Mansfield 将他们的实验结果对各种 x 关系进行了拟合, 结果如图 12。

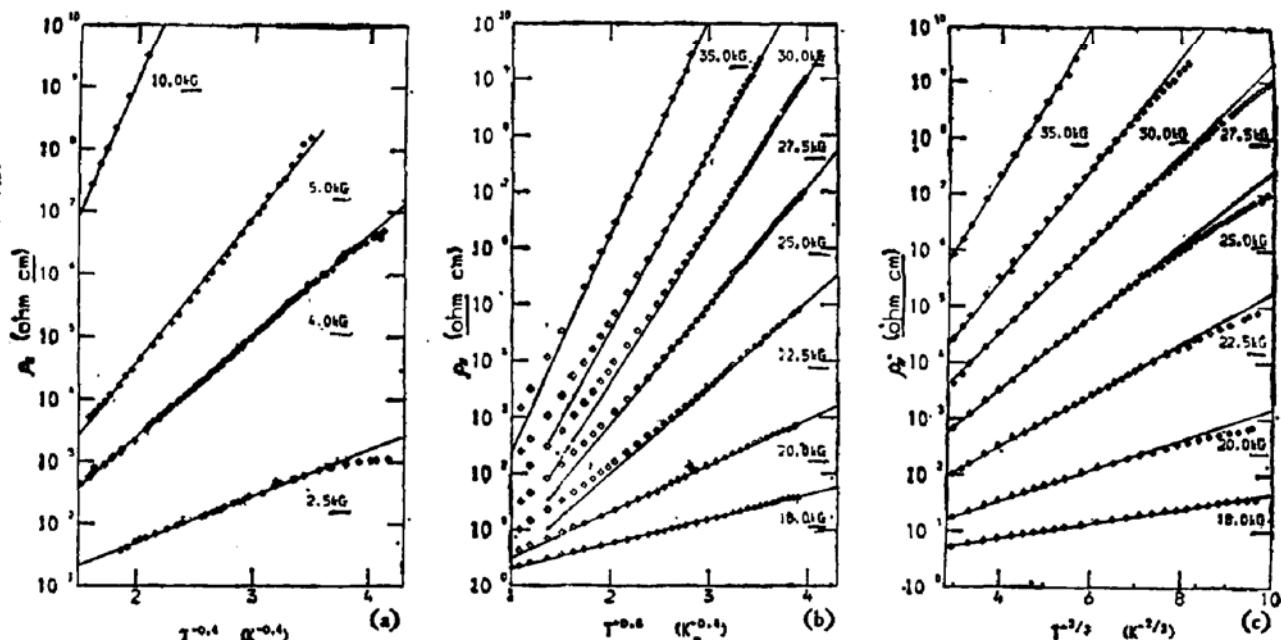


图 12 x 值的实验结果
(a) 6313 号样品 (b) 1015 号样品 (c) 1514 号样品

Shklovskii 根据 Miller 和 Abrahams 的理论得出, 如果 E_F 处有腋隙, 在腋隙附近态密度可写成 $g(\epsilon) = g_0 + N_0 \epsilon^2$ 。在两个极限情况下可得到 x 的值

$$\left. \begin{aligned} g_0 \gg N_0 \epsilon^2 & \text{时 } x = \frac{2}{5} \\ g_0 \ll N_0 \epsilon^2 & \text{时 } x = \frac{2}{3} \end{aligned} \right\}$$

按本文的计算, 在强磁场下的杂质带态密度中出现的腋隙随 S 值的增大而变深。随 S 值不同, 腋隙附近的态密度可分别满足条件 $g_0 \gg N_0 \epsilon^2$ 和 $g_0 \ll N_0 \epsilon^2$ 从而使 x 值分别为 $2/3$ 和 $2/5$ 。

表 2 中列出了三种样品 S 值的计算结果。1514 号样品 S 值很大, 按上面讨论, 应有较深的腋隙, $x = \frac{2}{3}$ 。相反, 6313 和 1015 号样品的 x 应为 $\frac{2}{5}$, 这与 Tokumoto 等人的实验相符。

表 2

样 品	$n_D(a_B^{3-5})$	r	s
6313	0.045	2—8	1.8—5.3
1015	0.41	15—30	3.1—6.0
1514	0.11	15—30	13—23

Efros 等人认为局域电子间的库仑作用引起的关联会在电子的等效态密度中引入赝隙，称为库仑隙。对于实际情况，有可能库仑作用和磁场效应同时起作用。至于各种情况下哪个因素是主要的，是一个值得进一步讨论的问题。

4. 补偿为零时 Mott 转变的讨论

补偿为零时，强磁场下杂质带电子的等效自旋是平行的。所以在 $T = 0$ 时 N_D 个电子正如占满下 Hubbard 带。如果上、下 Hubbard 带不交迭，则体系从带结构上讲是个绝缘体。

如果减小磁场，使杂质带交迭，就会发生“带交迭”型的金属-非金属转变。上节中我们计算了上、下 Hubbard 带的交迭条件。这也就是这种转变的条件。

现在还没查到 $K = 0$ 的 n-InSb 样品的实验。所以这一计算只是一个理论预测。

参 考 文 献

- [1] N. F. Mott and E. A. Davis, *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*, (1979) 2nd Ed.
- [2] W. Sasaki, *Supplement of the Progress of Theoretical Physics*, 72, 169 (1982).
- [3] D. Ferre, H. Dubois, G. Biskuski *Phys. Stat. Sol.* (6) 70 81 (1975).
- [4] H. Tokumoto and L. Mansfield, Lea, *Phil. Mag.*, B46, 93 (1982).
- [5] Y. Yafat, R. W. Keyes and E. N. Adams, *J. Phys. Chem. Sol.*, 1, 137 (1956).
- [6] P. J. Lin-Chung and B. W. Henvis, *Phys. Rev.*, B12, 630 (1975).
- [7] R. J. Elliott, *Phys. Rev.*, 96, 266 (1954).
- [8] J. Simola and J. Virtamo, *J. Phys.* B11, 3309 (1978).
- [9] R. O. Meuller, *Phys. Rev.*, A11, 789 (1975).
- [10] P. Pröschel, *J. Phys.*, B15, 1959 (1982).
- [11] D. M. Larsen, *Phys. Rev.* B20, 5217 (1979).
- [12] H. S. Brandi, *Phys. Rev.*, A11, 1835 (1975).
- [13] J. Virtamo, *J. Phys.*, B9, 751 (1976).
- [14] R. J. Elliott and R. Loudon, *J. Phys. Chem. Sol.*, 15, 196 (1960).
- [15] N. F. Mott and W. D. Twose, *Adv. Phys.*, 10, 107 (1961).
- [16] S. D. Jag and P. R. Wallace, *J. Phys.*, C11, 2763 (1978).
- [17] S. D. Jag and P. R. Wallace, *Solid State Commun.*, 24, 225 (1977).

Theory of Conductivity and Impurity Band of n-InSb under Strong Magnetic Field

Huang Min

(Engineering Optical Department, Beijing Technology Institute)

Han Ruqi

(Department of Computer Science, Peking University)

and Gan Zizhao

(Department of Physics, Peking University)

Abstract

Based on the results of the theory of atom under superstrong magnetic field, a model Hamiltonian of Electrons is n-InSb under strong magnetic field is constructed. Using the method of configuration average, the zero order spectrum of the impurity band, the zero order DOS function and the Anderson's transition condition are calculated. The results of the theoretical calculations are in good agreement with the experiments.