Письма в ЖЭТФ, том 9, стр.475–480 *20 апреля 1969 г.*

МАГНИТО-КУЛОНОВСКИЕ УРОВНИ ВБЛИЗИ СЕДЛОВЫХ ТОЧЕК

Э.И.Рашба, В.М.Эдельштейн

Гипотеза о возникновении метастабильных кулоновских уровней вблизи седловых критических точек энергии $E(\mathbf{k})$ была высказана в работе [1] в связи с интерпретацией структуры спектров собственного поглощения ряда кристаллов. Ее теоретическое обоснование, однако, встречается с серьезными трудностями [2,3], и сам факт возникновения подобных резонансов на кривой поглощения может быть доказан, по-видимому, лишь при специальных допущениях (например, при большом отношении масс [3]; для глубоких уровней вследствие конечности объема бриллюэновской зоны [4]).

Ниже показано, что в сильных магнитных полях метастабильные кулоновские уровни электрона должны возникать вблизи всех критических точек (причем для минимумов и гребней типа M_2 в притягивающем поле, а для гребней M_1 и максимумов – в отталкивающем), и определена угловая зависимость параметров возникающих состояний.

Пусть в исходных прямоугольных координатах x, y, z эффективные массы $m_x = m_y = m_\perp$, $m_z = m_\parallel$, причем знак $m_\perp$ и $m_\parallel$ произволен, магнитное поле $\mathbf{H}$: $H_x = 0$, $H_y/H_z = \operatorname{tg}\theta$, а векторный потенциал $\mathbf{A} = 1/2[\mathbf{H}\mathbf{r}]$. Тогда в косоугольной системе ξ, η, ζ

$$\xi = \left|\frac{m_\perp}{M_\perp}\right|^{1/2} x, \quad \eta = \left|\frac{M_\perp}{m_\perp}\right|^{1/2} (\cos\theta\, y - \sin\theta\, z),$$

$$\zeta = \frac{M_\perp^2}{m_\perp}\left(\frac{\sin\theta}{m_\parallel} y + \frac{\cos\theta}{m_\perp} z\right),$$

$$\frac{1}{M_\perp(\theta)} = \left(\frac{\sin^2\theta}{m_\parallel\, m_\perp} + \frac{\cos^2\theta}{m_\perp^2}\right)^{1/2}, \quad M_\parallel(\theta) = m_\parallel\left(\frac{m_\perp}{M_\perp(\theta)}\right)^2, \qquad (1)$$

в которой ось ζ выбрана вдоль $\mathbf{H}$ с сохранением масштаба (а якобиан перехода равен единице), гамильтониан

$$\mathcal{H} = \frac{\operatorname{sign} m_\perp}{2M_\perp}\left[\left(p_\xi - \frac{eH}{2c}\eta\right)^2 + \left(p_\eta + \frac{eH}{2c}\xi\right)^2\right] -$$

$$- \frac{\hbar^2}{2M_\parallel}\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2} - \frac{Ze^2}{\kappa r}, \qquad (2)$$

где Z – зарядность центра, а

$$r^2 = \zeta^2 + \left|\frac{M_\perp}{m_\perp}\right|^{3/2} \frac{m_\parallel - m_\perp}{m_\parallel} \sin 2\theta \sin\phi\, \rho\zeta +$$

$$+ \left|\frac{M_\perp}{m_\perp}\right| \left\{\cos^2\phi + \left(\frac{M_\perp}{m_\perp m_\parallel}\right)^2 (m_\parallel^2 \cos^2\theta + m_\perp^2 \sin^2\theta) \sin^2\phi\right\} \rho^2 ; \quad (3)$$

здесь ρ, ϕ – полярные координаты на плоскости ξ, η.

Как следует из формул (1) и (2), квантование Ландау возникает при $m_\parallel/m_\perp > 0$, а также при $m_\parallel/m_\perp < 0$, если $\theta < \theta_{cr}$, $\operatorname{tg}^2\theta_{cr} = |m_\parallel/m_\perp|$. Это соответствует траекториям в $\mathbf{k}$-пространстве, расположенным вблизи критической точки [5,6]. При $\theta > \theta_{cr}$ квазиклассическая орбита в магнитном поле простирается на расстояния порядка размеров бриллюэновской зоны [5,7] и метод эффективной массы неприменим; этот случай мы исключим из рассмотрения. При $\theta \to \theta_{cr}$ масса $M_\perp \to \infty$, а $M_\parallel \to 0$.

Если энергия Ландау $\hbar\omega(\theta)$ $(\omega(\theta) = eH/M_\perp c)$ значительно больше кулоновской, спектр гамильтониана (2) – (3) может быть найден в адиабатическом приближении аналогично [8,9]. Уровни Ландау при $m_\perp > 0$ расположены выше критической точки, а при $m_\perp < 0$ – ниже ее; первому уровню соответствуют состояния $n_\rho = 0$, $m \leqslant 0$ [10]. Из формулы (2) очевидно, что вблизи них смогут возникать кулоновские уровни лишь если $Zm_\parallel > 0$. Кулоновский уровень расположен под соответствующим уровнем Ландау при $Z > 0$ (притягивающий потенциал) и над ним – при $Z < 0$ (отталкивающий).

В низшем приближении волновая функция продольного движения $F(\zeta)$ и энергия E_c основного кулоновского уровня равны

$$F(\zeta) \approx \frac{1}{\sqrt{na}} W_{n,1/2}\left(\frac{2\zeta}{na}\right), \quad E_c \approx -\frac{\hbar^2}{2M_\parallel (na)^2}, \tag{4}$$

где $W_{n,1/2}$ – функция Уиттекера $(W_{n,1/2}(0) = 1)$, а

$$a_0 = \frac{\kappa\hbar^2}{Zm_\parallel e^2}, \quad a = \frac{\kappa\hbar^2}{ZM_\parallel e^2}, \quad \frac{1}{n} = \ln\left(\frac{a\sqrt{aa_0}}{4\lambda^2}\right),$$

$$\lambda^2 = \frac{c\hbar}{eH}. \tag{5}$$

Из формулы (4) видно, что na играет роль радиуса продольного движения. Так как $a \to \infty$ при $\theta \to \theta_{cr}$, мы проводим различие в (5) между a и a_0 под знаком логарифма.

Так как кулоновский потенциал согласно (3) в новых координатах не обладает аксиальной симметрией, в следующем приближении возникают как диагональные, так и недиагональные по m матричные элементы энергии; они имеют порядок nE_c. Поэтому расщепление кулоновских уровней, возникающих из зон с разными m, порядка nE_c.

Магнитно-кулоновские уровни, возникающие вблизи гребней M_1 и M_2, лежат на непрерывном спектре зон с бо́льшими n_ρ. Поэтому бу дут происходить распады связанных состояний с переходом электрона в состояния с бо́льшими n_ρ и импульсами k_ζ, определяемыми сохранением энергии. Матричный элемент распада связанного состояния с $n_\rho = 0$ при $\theta = 0$ (когда сохраняется m) равен

$$<0m|\frac{Ze^2}{\kappa r}|n_\rho m k_\zeta> = \frac{Ze^2}{\kappa}\frac{1}{\sqrt{2\pi n a_0}}\left(\frac{|m|!}{n_\rho!\,(n_\rho+|m|)!}\right)^{1/2}\times$$

$$\times\int_0^\infty d\sigma\,\frac{e^{-\sigma}\,\sigma^{n_\rho+|m|}}{(\sigma+|m_\parallel/m_\perp|\,n_\rho)^{|m|+1}}; \qquad (6)$$

функция конечного состояния предполагается нормированной на интервал k_ζ. Согласно (6) он убывает с ростом m и мы приведем оценку полной вероятности распада лишь при $m = 0$; ряд сходится, как $n_\rho^{-5/2}$, и [1]

$$\frac{\Gamma_{00}}{E_c} < 4Z^2 n\frac{\lambda}{a_0}\left|\frac{m_\perp}{m_\parallel}\right|^{1/2}\left[\min\left(1,\left|\frac{m_\perp}{m_\parallel}\right|\right)\right]^2. \qquad (7)$$

В принятом приближении $n\lambda/a_0 \ll 1$, и, следовательно, $\Gamma_{00} \ll E_c$. Грубая оценка вероятности распада с большой передачей импульса под действием потенциала атомного порядка, действующего на расстояниях порядка постоянной решетки d, дает $\Gamma/E_c \approx n\kappa(d/\lambda)^2$, что мало́ в условиях применимости метода эффективной массы. Следовательно, критерий существования метастабильных состояний выполняется.

Один из наиболее интересных случаев, в которых можно ожидать проявления магнито-кулоновский уровней вблизи седловых точек, это примесное поглощение света электронами глубоких примесных уровней. В многозарядных центрах электрон, возбуждаемый светом в зону проводимости, оказывается в отталкивающем поле отрицательно заряженного центра, и поэтому в сильном магнитном поле у него должны существовать метастабильные уровни вблизи M_1. Полная сила осцил-

---

[1] Сходная формула была получена в работе [11] для ширины возбужденных уровней локального центра.

лятора для перехода на примесные уровни с определенным n_ρ порядка

$$f_{n_\rho} \sim d^3 \mid \psi(0)\mid^2 = \frac{1}{2\pi}\frac{d^3}{\lambda^2 a n}, \qquad (8)$$

и существенно зависит от величины и направления **H**. В тех случаях, когда эти переходы попадают в зону прозрачности, они по-видимому должны быть доступны для наблюдения.

Если переходы происходят между состояниями большого радиуса у параболической и гиперболической точек, то сила осциллятора по порядку величины может достигать единицы, причем в пределе больших H она слабо (логарифмически) зависит от величины поля и сильно $(\sim M_\perp^{-3/2}(\theta))$ – от его ориентации.

Изложенные выше результаты справедливы при $E_c \ll \hbar\omega$; выполнению этого критерия, как обычно, способствуют большое κ и малые значения $m_\perp$ и $m_\parallel$. По-видимому для седловых точек реже всего встречается случай малых $m_\parallel$; однако, как видно из формулы (7), при малом $\mid m_\perp / m_\parallel \mid$ ширина уровня Γ мала даже когда $E_c/\hbar\omega$ не очень мало, и поэтому основные качественные выводы должны остаться в силе. Заметим попутно, что выполнение условия адиабатичности облегчается при $\theta \to \theta_{cr}$.

Аналогичная картина имеет место и для гиперболических экситонов, однако для них теория более сложна; она будет изложена отдельно.

Институт теоретической физики
им.Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
20 февраля 1969 г.

Литература

[1] J.C.Phillips. Phys. Rev.Lett., **10**, 329, 1963; **12**, 142, 1964.
[2] C.B.Duke, D.Segall. Phys. Rev. Lett., **17**, 19, 1966.
[3] B.Velický, J.Sak. Phys. Stat. Sol., **16**, 147, 1966.
[4] J.Hermanson. Phys. Rev. Lett., **18**, 170, 1967.
[5] И.М.Лифшиц, М.И.Каганов. УФН, **69**, 419, 1959.
[6] A.Baldereschi, F. Bassani. Phys. Rev. Lett., **8**, 66, 1967.
[7] M.Guira, F.Wanderlingh. Phys. Rev. Lett., **20**, 445, 1968.
[8] R.J.Elliott, R.Loudon. J.Phys. Chem. Sol., **8**, 382, 1959; **15**, 196, 1960.

[9] H.Hasegawa, R.E.Howard. J.Phys. Chem. Sol., 21, 179, 1961.
[10] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963, § 111.
[11] С.Д.Бенеславский. ФТТ, 10, 3162, 1968.