

Министерство образования Российской Федерации
—
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

В. А. Кособукин

ТЕОРИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

Твердые тела с сильным беспорядком

Учебное пособие

Санкт-Петербург
Издательство СПбГТУ
2000

УДК 539.2

Кособукин В.А. Теория неупорядоченных систем. Твердые тела с сильным беспорядком. Учеб. пособие. СПб: Изд-во СПбГТУ, 2000, 68 с.

Пособие соответствует авторскому курсу по дисциплине "Физика неупорядоченных твердых тел" направления 553100 "Техническая физика" бакалаврской и магистерской подготовки по специальностям 553102 "Физика и техника полупроводников" и 553104 "Физика структур пониженной размерности". Представляет собой вторую часть курса лекций "Теория неупорядоченных систем", читаемых студентам физико-технического факультета СПбГТУ. Обсуждаются общие свойства твердотельных систем с сильным беспорядком, переходы металл – изолятор, элементы теории протекания, плотность состояний и флуктуационные уровни в глубине квазизапрещенной зоны полупро-водников.

Предназначено для студентов физико-технического факультета.
Ил.: 20. Библиогр.: 17. Табл.: 1.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Санкт-Петербургского государственного технического университета

© Кособукин В.А., 2000
© Санкт-Петербургский государственный
технический университет, 2000

Предисловие

В данном пособии обсуждаются основные физические свойства сильно неупорядоченных твердых тел, главным образом таких, как легированные [1–2] и аморфные [3–5] полупроводники, а также металлы с примесями [16]. Заметим, что имеющаяся литература, в частности книги [1–5, 10–16], является по существу монографической и сложна для первого знакомства с предметом. Поэтому свою задачу мы видим в изложении базовых идей теории неупорядоченных систем на физическом уровне, без привлечения сложного математического аппарата. Из перечисленных книг этому условию в максимальной степени удовлетворяют монографии [1–3] и гл. XIX учебника [4], к которым мы рекомендуем обратиться в первую очередь для более глубокого изучения предмета. Данные опытов привлекаются далее только в целях иллюстрации теоретических положений: предполагается что совокупность весьма разнообразных экспериментальных фактов [13–15] легко может быть освоена теми, кто овладел принципами теории. Вместе с тем для чтения настоящего пособия вполне достаточно предварительного знакомства с вводным курсом [6], на который поэтому дается много ссылок.

Глава 1. Общие свойства неупорядоченных систем

§ 1. Основные особенности сильно неупорядоченных систем

А. Локализованные и делокализованные состояния. Известно, что в дефектных областях кристалла возможно образование локализованных собственных состояний. Следовательно, в любой неупорядоченной системе, квантовой или классической, могут существовать собственные состояния двух типов: 1) делокализованные (распространяющиеся) и 2) локализованные. Для иллюстрации на рис. 1 схематически представлены волновые функции состояний указанных двух типов в случае электронов. Для *делокализованных* состояний характерно то, что плотность вероятности нахождения электрона в разных частях образца сравнима по величине. Предельным случаем делокализованных состояний являются плоские волны или (в случае периодической системы) блоховские состояния. Волновые функции последних удовлетворяют соотношению

$$|\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})|^2 = |\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})|^2 = |\Psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_n)|^2$$

при сколь угодно большом векторе трансляции решетки \mathbf{R}_n . Локализованные состояния характеризуются экспоненциальным убыванием волновой функций $|\Psi(\mathbf{r})| \sim \exp(-|\mathbf{r}|/a)$ на характерной длине локализации a .

Различия между локализованными и делокализованными собственными состояниями могут проявляться в процессах переноса,

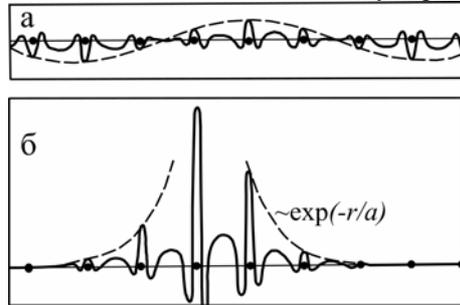


Рис. 1. Вещественная часть волновой функции блоховского (а) и локализованного (б) состояний электрона. Пунктиром показана огибающая соответствующей волновой функции.

например в электропроводности. Делокализованные состояния ответственны за перенос электрического заряда при любой температуре, если, конечно, нет запрещенной зоны по энергии между заполненными и незаполненными состояниями. При этом проводимость имеет металлический характер.

Локализованные состояния не дают вклада в проводимость на постоянном токе при нулевой температуре, т. е. они обуславливают диэлектрические свойства. Если волновые функции разных локализованных состояний перекрываются, то при определенных обстоятельствах возможен активационный перенос заряда по ним. При низких температурах он проявляется в форме прыжкового механизма проводимости путем перескоков электрона с одного центра локализации на другой. При критическом изменении соотношения между числом делокализованных и локализованных состояний возможно изменение характера проводимости, известное как переход металл – диэлектрик.

Б. Случайное поле потенциальной энергии электрона. Физические явления в макроскопических неупорядоченных системах

описываются с помощью *случайных полей* (общие сведения о них см. в [5, 17]). Случайное поле не является однозначной функцией радиус-вектора \mathbf{r} , а в любой заданной точке \mathbf{r} представляет собой случайную величину, которая может принимать всевозможные значения. При этом говорят только о плотности вероятности того или иного значения. В случае системы, однородной в среднем, эта плотность вероятности одинакова для всех точек пространства. Уравнение, в которое входит случайное поле, становится стохастическим, а вычисляемые на его основе физические величины – случайными.

Свойства вещественных случайных полей проиллюстрируем на примере потенциала одноэлектронного уравнения Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) - E \right] \cdot \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (1.1)$$

В общем случае потенциальная энергия электрона $U + V$ включает в себя регулярный $U(\mathbf{r})$ и случайный $V(\mathbf{r})$ вклады. Случайное поле потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$ можно выбрать так, что $\langle V(\mathbf{r}) \rangle = 0$, где угловые скобки обозначают статистическое усреднение по ансамблю реализаций случайного потенциала $\{V(\mathbf{r})\}$, т. е. по всем реализациям поля $V(\mathbf{r})$ в макроскопической неупорядоченной системе. С физической точки зрения случайные функции $V(\mathbf{r})$ должны удовлетворять следующим требованиям.

1. Случайная функция $V(\mathbf{r})$ определена в макроскопически большой области Ω .

2. Корреляционные функции случайного поля инвариантны относительно сдвига всех аргументов \mathbf{r}_i на один и тот же вектор. В частности, для корреляторов низших порядков имеем

$$\langle V(\mathbf{r}) \rangle = \langle V(0) \rangle = 0, \quad \langle V(\mathbf{r}_1) \cdot V(\mathbf{r}_2) \rangle = \langle V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot V(0) \rangle. \quad (1.2)$$

Это свойство выражает пространственную *однородность в среднем* (трансляционную инвариантность) макроскопической неупорядоченной системы.

3. Усреднение по любым двум достаточно удаленным друг от друга макроскопическим областям распадается на независимые усреднения по каждой из них. Это свойство означает *статистическую независимость* (отсутствие корреляции) макроскопических областей

системы, находящихся на больших расстояниях друг от друга. Математически это выражается в разделении коррелятора на относящиеся к независимым объемам корреляторы меньших порядков при $|\mathbf{a}| \rightarrow \infty$:

$$\langle V(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}) \dots V(\mathbf{r}_n + \mathbf{a}) \cdot V(\mathbf{r}'_1) \dots V(\mathbf{r}'_m) \rangle \rightarrow \langle V(\mathbf{r}_1) \dots V(\mathbf{r}_n) \rangle \cdot \langle V(\mathbf{r}'_1) \dots V(\mathbf{r}'_m) \rangle. \quad (1.3)$$

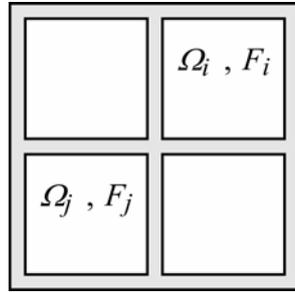


Рис. 2. Усреднение по объему макроскопического образца в опыте.

Случайное поле $V(\mathbf{r})$ может быть обусловлено различными физическими причинами. Простейшей моделью случайного потенциала $V(\mathbf{r})$ служит совокупность потенциальных ям заданной формы и случайной глубины или/и ширины. Вследствие того, что потенциал $V(\mathbf{r})$ и включающее его уравнение

Шредингера (1.1) являются стохастическими, предсказания теории имеют вероятностный характер. В частности, для случайной системы нет смысла выяснять, является ли данное значение собственной энергии электрона разрешенным (реализующимся со стопроцентной вероятностью). Разумно говорить лишь о вероятности получить данное значение энергии и о принадлежности этого уровня энергии к дискретному или непрерывному спектру.

В. Статистические свойства неупорядоченных систем и самоусредняемость. Хотя разные неупорядоченные материалы могут обладать различными физическими свойствами, принципы теории всех неупорядоченных конденсированных систем в общем сходны. Задачей теории является вычисление *средних значений наблюдаемых* величин, которые нужно сравнивать с опытом. В опыте обычно имеют дело со всем образцом или его частью, в которых содержится макроскопически большое число частиц. Таким образом, наблюдаемые в опыте величины представляют собой результат усреднения по объему образца Ω . Макроскопический объем Ω можно представить себе как совокупность достаточно большого числа макроскопических

подобъемов Ω_i , так что $\Omega = \sum_i \Omega_i$ (рис. 2). Если подобъемы Ω_i макроскопически большие и их взаимодействием через границы раздела можно пренебречь, то согласно (1.3) свойства разных подобъемов Ω_i не коррелируют друг с другом. При таких условиях в каждом из подобъемов Ω_i имеет место своя *реализация* случайного поля (например, реализуется своя конкретная макроскопическая конфигурация атомов легирующей примеси). Совокупность всех возможных независимых реализаций неупорядоченной системы, которые макроскопически неразличимы, называется статистическим ансамблем.

В макроскопическом опыте обычно имеют дело с *аддитивными* физическими величинами F_Ω , которые возрастают пропорционально объему Ω системы (числу частиц N в ней). При этом физический интерес представляют удельные (рассчитанные на единицу объема) значения F_Ω/Ω таких величин. К удельным аддитивным величинам относятся плотность состояний и кинетические коэффициенты (коэффициенты переноса). Удельная аддитивная физическая величина называется *самоусредняющейся*, если ее значение F_Ω/Ω стремится к детерминированному (неслучайному) пределу при $\Omega \rightarrow \infty$ и условии, что $N/\Omega \rightarrow \bar{N} = const$. Интуитивно ясно, что если измеряемая величина является самоусредняющейся, то можно говорить о воспроизводимости (практической достоверности) данных опыта для макроскопически неразличимых образцов.

Физически возникновение самоусредняемости связано с описанными выше особенностями макроскопического опыта (рис. 2). Разбиение $\Omega = \sum_i \Omega_i$ объема системы Ω на макроскопические подобъемы Ω_i позволяет представить аддитивную величину F_Ω в виде суммы по макроскопическим подобъемам Ω_i , т. е. в пренебрежении эффектами границ раздела $F_\Omega = \sum_i F_i$, где $F_i \equiv F_{\Omega_i}$ относится к подобъему Ω_i . Если случайное поле, определяющее величину F_Ω , удовлетворяет корреляционным свойствам (1.2) и (1.3), то статистические свойства величин $F_i \equiv F_{\Omega_i}$ в разных подобъемах Ω_i одинаковы (свойство 2), а корреляции между F_i и F_j , где $i \neq j$,

отсутствуют (свойство 3). Это означает, что случайная величина F_i в подобъеме Ω_i может принимать любые значения независимо от величин F_j в других подобъемах Ω_j . В случае достаточно большого числа подобъемов ($\Omega/\Omega_i \gg 1$) формула

$$\frac{F_\Omega}{\Omega} = \frac{\sum_i F_i}{\Omega} = \sum_i \frac{F_i}{\Omega_i} \frac{\Omega_i}{\Omega} = \sum_J \frac{F_J}{\Omega_J} w_J \quad (1.4)$$

определяет среднее значение величины F_Ω/Ω . Здесь величина w_J выражает относительный объем Ω_J/Ω части образца, где реализовано значение F_J/Ω_J случайной величины. Таким образом, w_J – это вероятность появления значения F_J/Ω_J , причем $\sum_J w_J = 1$.

Усредненное по объему системы Ω значение детерминированной функции $f[V(\mathbf{r})]$, зависящей от случайного поля $V(\mathbf{r})$, определим выражением [17]

$$\langle f[V(\mathbf{r})] \rangle = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\Omega} \int_\Omega d^3 r' f[V(\mathbf{r}')] , \quad (1.5)$$

аналогичным (1.4). Считается, что среднее (1.5) по объему $\Omega \rightarrow \infty$ совпадает со значением, полученным при усреднении по ансамблю реализаций случайного поля в любом из макроскопически больших подобъемов системы (это – гипотеза пространственной эргодичности [5, 11, 17], аналог гипотезы временной эргодичности, известной из статистической физики [7, § 1, 4]).

Для системы, однородной в среднем, формулы (1.4) или (1.5) дают основание заменить усреднение по объему Ω эквивалентным усреднением величины F/Ω по ее статистическому распределению. Последнее соответствует ансамблю реализаций случайного поля в одном из макроскопических подобъемов Ω_i (несущественно, в каком именно, т. к. по свойству (1.2) все подобъемы эквивалентны). Пример такого вычисления будет дан в § 12. В дальнейшем результат усреднения величины $f = F/\Omega$ будем обозначать угловыми скобками как $\langle f \rangle$.

Примером самоусредняющейся (детерминированной в макроскопическом пределе) величины служит плотность состояний

$$g(E) = \lim_{\Omega \rightarrow \infty} (1/\Omega) dN(E)/dE, \quad \int_{-\infty}^{\infty} g(E) dE = N/\Omega = \bar{N}. \quad (1.6)$$

Плотность состояний выражает средний по образцу спектр энергии E собственных состояний. Функция $g(E)$ не несет никакой информации о структуре самих состояний в системе, в частности, о том, являются ли эти состояния локализованными или делокализованными. Плотность состояний макроскопического неупорядоченного образца, будучи самоусредняющейся величиной, имеет достоверный (не статистический) характер. Особенности плотности состояний аморфных твердых тел в сравнении с кристаллическими обсуждаются в § 3 и 4. В следующем параграфе вычисляются в общем виде проводимость и коэффициент оптического поглощения, которые также являются самоусредняющимися величинами.

§ 2. Формула Кубо – Гринвуда для проводимости

Если длина свободного пробега электронов велика по сравнению со средними межатомными расстояниями, то проводимость и другие кинетические коэффициенты можно вычислять на основе уравнения Больцмана. Однако этот подход становится неприменимым к сильно неупорядоченным системам, в которых длина свободного пробега электрона может стать сравнимой с расстоянием между атомами. Следуя [12, 13], мы дадим здесь элементарный вывод формулы для электрической проводимости, которая применима в случае апериодических систем с малой длиной свободного пробега электронов. Будем рассматривать проводимость при низких температурах, которая определяется свойствами электронов с энергиями вблизи уровня Ферми μ .

Пусть собственные энергия E и функция $\Psi_E(\mathbf{r})$ электрона в апериодическом поле $V(\mathbf{r})$ определяются уравнением Шредингера

$$\hat{H}^{(0)}\Psi_E = E\Psi_E, \quad \text{где} \quad \hat{H}^{(0)} = -\hbar^2\nabla^2/(2m) + V(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Индекс E волновой функции $\Psi_E(\mathbf{r})$ может включать в себя кроме собственной энергии и другие возможные квантовые числа. Удобно рассматривать решение невозмущенной задачи (2.1) в макроскопическом объеме Ω , считая $V(\mathbf{r})$ одной из реализаций случайного

потенциала и нормируя Ψ_E на один электрон в объеме Ω .

Приложенное вдоль оси x внешнее однородное электрическое поле с частотой ω и амплитудой F_0 определяет возмущение электронного гамильтониана

$$H' = (1/2) e x F_0 \{ \exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t) \}, \quad (2.2)$$

периодически зависящее от времени t . Под влиянием возмущения (2.2) возможен переход электрона $E \rightarrow E'$ из начального состояния Ψ_E в конечное $\Psi_{E'}$ с поглощением кванта энергии $\hbar\omega = E' - E$ или переход $E' \rightarrow E$ с испусканием такого же кванта. Вероятность перехода $E \rightarrow E'$ в непрерывном спектре определяется формулой

$$w_{E'E} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{E'E}|_{\text{cp}}^2 \Omega g(E'). \quad (2.3)$$

Здесь $\Omega g(E')$ – число конечных состояний [8, § 42], а индекс "ср" обозначает усреднение по всем состояниям вблизи энергии $E' = E + \hbar\omega$. Последнее связано, в частности, с невозможностью для макроскопического тела находиться в строго стационарном состоянии из-за очень густого расположения уровней в спектре собственной энергии [7, § 7].

Подставив (2.2) в (2.3), находим

$$w_{E'E} = \frac{2\pi}{\hbar} e^2 |x_{E'E}|_{\text{cp}}^2 F_0^2 \frac{1}{4} \Omega g(E') = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e\hbar}{m\omega} \right)^2 |D_{E'E}|_{\text{cp}}^2 F_0^2 \frac{1}{4} \Omega g(E'). \quad (2.4)$$

Здесь второе равенство получено с учетом следующего соотношения

$$x_{E'E} = -\frac{\hbar}{m\omega} D_{E'E} \quad (2.5)$$

между матричными элементами $x_{E'E} \equiv \int d^3r \Psi_{E'}^* x \Psi_E$ и $D_{E'E} = \int d^3r \Psi_{E'}^* \partial \Psi_E / \partial x$. Выражение (2.5) получается при условии $E' = E + \hbar\omega$ из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \Psi_{E'}^* (E' - E) x \Psi_E &= -\left(\hbar^2 / 2m \right) \Psi_{E'}^* \left\{ \nabla^2 (x \Psi_E) - x \nabla^2 \Psi_E \right\} = \\ &= -\left(\hbar^2 / m \right) \Psi_{E'}^* (\partial \Psi_E / \partial x), \end{aligned}$$

в которой каждое выражение равно величине $\Psi_{E'}^* (\hat{H}^{(0)}_x - x\hat{H}^{(0)}) \Psi_E$, включающей в себя коммутатор $\hat{H}^{(0)}_x - x\hat{H}^{(0)} = -(\hbar^2/m)\partial/\partial x$.

Вероятность поглощения кванта $\hbar\omega$ в единице объема системы при переходе $E \rightarrow E'$ равна $2w_{E'E} [1 - f(E')] f(E) g(E)$, а вероятность излучения при переходе $E' \rightarrow E$ равна $2w_{EE'} f(E') [1 - f(E)] g(E')$, где учтено двухкратное вырождение электронных состояний по спину. Множители $f(E)$ или $1 - f(E)$ описывают вероятности того, что электронное состояние с энергией E свободно или занято соответственно. Учитывая принцип микроскопической обратимости в форме $w_{E'E} = w_{EE'}$, находим для скорости электромагнитного поглощения в единице объема формулу

$$2 \int dE w_{E'E} \hbar\omega \{ g(E) f(E) [1 - f(E')] - g(E') f(E') [1 - f(E)] \}. \quad (2.6)$$

Приравняем величину (2.6) и выражение $(1/2)\sigma(\omega)F_0^2$ для скорости потерь энергии в единице объема среды с электропроводностью $\sigma(\omega)$. Это дает для коэффициента электропроводности, измеряемого в макроскопическом опыте, выражение

$$\sigma(\omega) = \int dE \sigma_E(\omega) \frac{f(E) - f(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega}, \quad (2.7)$$

в котором

$$\sigma_E(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} |D_{E+\hbar\omega, E}|_{\text{cp}}^2 g(E + \hbar\omega) g(E). \quad (2.8)$$

Заметим, что объем Ω , явное присутствие которого в (2.8) и далее связано с нормировкой функций Ψ_E , исчезает при учете конкретных выражений для Ψ_E , как и должно быть для удельной аддитивной величины $\sigma(\omega)$. Результаты (2.7), (2.8) для электропроводности позволяют выразить коэффициент поглощения света $\alpha(\omega)$ на частоте ω , входящий в закон $I(z) = I_0 \exp(-\alpha z)$ затухания оптического потока при его распространении вдоль координаты z . Именно

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{c} \operatorname{Re} \sigma(\omega).$$

В формулах (2.6) и (2.7) $f(E) = \left\{ \exp[(E - \mu)/kT] + 1 \right\}^{-1}$ – распределение Ферми с химическим потенциалом μ при температуре T . При $T \rightarrow 0$ в (2.7) $f(E) - f(E + \hbar\omega) = \mathcal{G}(\mu - E) - \mathcal{G}(\mu - E - \hbar\omega)$, где $\mathcal{G}(x) = 0$ при $x < 0$ и $\mathcal{G}(x) = 1$ при $x > 0$. При этом из (2.7) следует выражение для проводимости:

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \int_{\mu - \hbar\omega}^{\mu} dE \left| D_{E + \hbar\omega, E} \right|_{\text{cp}}^2 g(E + \hbar\omega) \frac{1}{\hbar\omega} g(E), \quad (2.9)$$

которая связана с возбуждением электронов из полосы заполненных состояний шириной $\hbar\omega$ под уровнем Ферми.

В случае конечной температуры $T \neq 0$ для статической ($\omega = 0$) проводимости, учитывая, что $f(E) - f(E + \hbar\omega) \approx -\hbar\omega (\partial f / \partial E)_E$ при $\omega \rightarrow 0$, из (2.7) получаем

$$\sigma(0) = - \int dE \sigma_E(0) (\partial f / \partial E)_E, \quad (2.10)$$

где

$$\sigma_E(0) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \left| D_{E, E} \right|_{\text{cp}}^2 g^2(E). \quad (2.11)$$

Если $T \rightarrow 0$, то $-(\partial f / \partial E)_E = \delta(E - \mu)$ в (2.10), следовательно,

$$\sigma(0) = [\sigma_E(0)]_{E=\mu}. \quad (2.12)$$

Выражение (2.10) будем называть *формулой Кубо–Гринвуда*. Для теории локализации наибольший интерес связан с формулой (2.12), выражающей статическую проводимость при нулевой температуре.

Для *металла* в (2.11) и (2.12) $\left| D_{\mu, \mu} \right|_{\text{cp}}^2 \sim l/\Omega$ [12, 13], где l – длина свободного пробега электронов, и $g^2(\mu) \sim m^3 k_F^2 / \hbar^4$, $k_F^3 \sim n$ (для модели вырожденного газа с плотностью n и импульсом Ферми $\hbar k_F$ при $T = 0$ [7, § 56]). Используя эти оценки в (2.11), для статической проводимости металла из (2.12) получаем

$$\sigma(0) = e^2 n \tau / m = e^2 l m / (\hbar k_F), \quad (12.13)$$

где $\tau = l / v_F = l m / (\hbar k_F)$ – время релаксации электронов. Для кристаллического диэлектрика уровень Ферми расположен в запрещенной зоне, где $g(\mu) = 0$, поэтому $\sigma(0) = 0$.

При переходе металл – диэлектрик с ростом неупорядоченности (см. § 3 и 4) меняются как функция $g(E)$, так и матричные элементы $|D_{E,E}|_{\text{ср}}^2$. Как отмечалось в § 1, в случае макроскопического объема Ω величины типа (2.12) следует усреднить по ансамблю реализаций случайного потенциала $V(\mathbf{r})$. При этом если состояния с энергией E являются локализованными, то соответствующая средняя величина проводимости (2.12) равна нулю при $T = 0$, т. е.

$$\langle [\sigma_E(0)]_{E=\mu} \rangle = 0. \quad (2.14)$$

Следует подчеркнуть, что результат усреднения (2.14) не предполагает, что проводимость (2.12) точно равна нулю абсолютно для всех реализаций $V(\mathbf{r})$. Например, (2.12) не выполняется для проводящего идеального кристалла объемом Ω , который формально тоже является одной из возможных реализаций кристалла с примесями. Однако вероятность флуктуационного образования беспримесной (с числом примесных атомов $N = 0$) области объема Ω в кристалле со средней концентрацией примесей \bar{N} экспоненциально мала. Так, в случае распределения Пуассона $w_N = (\bar{N}\Omega)^N \exp(-\bar{N}\Omega) / N!$ [7, § 116] она равна $w_0(\Omega) = \exp(-\bar{N}\Omega)$ и стремится к нулю при $\Omega \rightarrow \infty$. Таким образом, соотношение (2.14) утверждает, что относительное число конфигураций примеси, для которых $\sigma_E(0) \neq 0$, стремится к нулю при неограниченном увеличении объема системы Ω .

Далее мы рассмотрим переходы металл – диэлектрик в электронной подсистеме. Эти переходы проявляются в изменении характера проводимости в зависимости от некоторого параметра, характеризующего систему. Металлическое состояние предполагает, что электронные состояния делокализованы и при $T = 0$ на уровне Ферми имеются квазисвободные электроны, обеспечивающие ненуле-

вую проводимость. *Диэлектрическое* состояние означает, что уровень Ферми находится в щели для подвижности (квазизапрещенной зоне), вследствие чего при $T = 0$ проводимость равна нулю. В зависимости от физических условий в неупорядоченных системах возможны два типа переходов металл – диэлектрик: 1) переход Андерсона, который происходит при изменении степени беспорядка, и 2) переход Мотта, который возможен при изменении среднего расстояния между атомами.

§ 3. Переход Андерсона (андерсоновская локализация)

Переход Андерсона в электронной подсистеме – это переход макроскопической системы из металлического состояния в диэлектрическое при усилении беспорядка. Если характеризовать степень беспорядка некоторым параметром, то можно сказать, что все волновые функции становятся локализованными, когда этот параметр превысит некоторое критическое значение (такой переход называется *андерсоновской локализацией*). Сразу заметим, что понятие об андерсоновской локализации может относиться не только к электронным, но и к другим волновым возбуждениям, как квантовой, так и классической природы [10, 11].

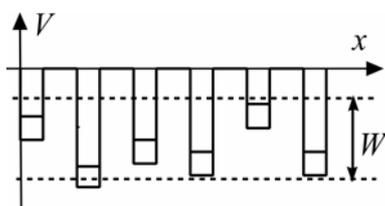


Рис. 3. Модель Андерсона.

Переход Андерсона для электронов удобно обсуждать на *модели Андерсона*. Для пространства любой размерности она схематически представлена на рис. 3 совокупностью потенциальных ям разной глубины, расположенных эквидистантно. Этой модели в одноэлектронном

приближении сильной связи соответствует уравнение для стационарных состояний [6, с. 18]

$$(E_i - E)c_i + \sum_{j(\neq i)} V_{ij} c_j = 0 . \quad (3.1)$$

Здесь c_i – амплитуда вероятности нахождения электрона в i -й яме,
в

которой уровень энергии электрона равен E_i . В (3.1) учитывается взаимодействие (перекрывание электронных волновых функций) только между ближайшими ямами. Для них матричные элементы $V_{ij} = -I$ считаются одинаковыми и, следовательно, неслучайными. Величина интеграла переноса I определяет энергетический масштаб задачи. Вследствие случайной глубины ям электронный уровень энергии E_i в любой яме является случайной величиной, причем уровни энергии E_i и E_j в разных ямах ($i \neq j$) не коррелируют друг с другом. Распределение вероятности уровней E_i по энергии $\varepsilon = E_i - \bar{E}$ считается одинаковым для всех ям и однородным:

$$p(\varepsilon) = \begin{cases} 1/W, & \text{если } |\varepsilon| < W/2, \\ 0, & \text{если } |\varepsilon| > W/2. \end{cases} \quad (3.2)$$

Таким образом, модель Андерсона характеризуется единственным безразмерным параметром W/I . Он определяет степень разупорядоченности, так как возрастает при увеличении разброса уровней энергии (глубины ям) в системе.

Основной вопрос теории – исследовать структуру электронных состояний при увеличении параметра W/I и оценить, при каком его критическом значении W_c/I все волновые функции электронов становятся локализованными, а сама система – диэлектриком.

В *стационарной* задаче (3.1), задавая случайный набор величин E_i с распределением (3.2) в системе достаточно большого числа ям N , можно найти собственную энергию $E(n)$ и соответствующие ей амплитуды $c_i^{(n)}$ для электрона в разных ямах, где $n=1,2,\dots,N$. Если при заданной собственной энергии электрона $E(n)$ существует проходящая через всю систему цепочка ям, на которых величины $|c_i^{(n)}|^2$ конечны и сравнимы друг с другом, то состояние с энергией $E(n)$ делокализовано, в противном случае оно локализовано. Чтобы сделать практически достоверные выводы, такие вычисления следует выполнить для большого числа реализаций макроскопической

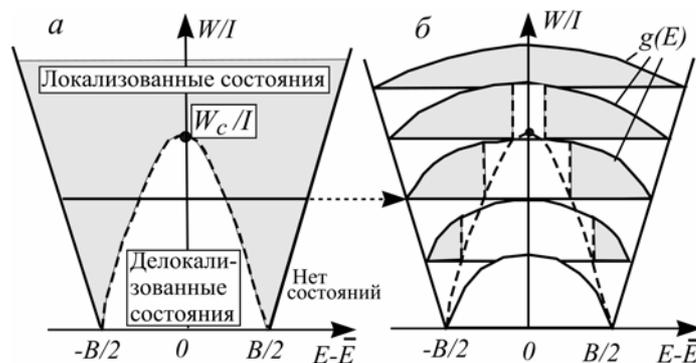


Рис. 4. Локализация в модели Андерсона: *а* – границы зоны разрешенных состояний по энергии в зависимости от W/I (сплошные линии) и положение краев подвижности (пунктирные линии); *б* – условное изображение соответствующей плотности состояний $g(E)$ при разных значениях W/I . Области локализованных состояний заштрихованы.

системы квантовых ям, откуда определяются вероятности различных состояний системы.

Типичные результаты численного моделирования структуры собственных состояний в трехмерной системе ям случайной глубины показаны схематически на рис. 4. Они демонстрируют, каким образом происходит переход металл – диэлектрик (изменение относительной доли делокализованных и локализованных состояний) при увеличении параметра W/I . На рис. 4*а* и *б* величина W/I отложена по оси ординат, а энергетический параметр состояний $E - \bar{E}$ – по оси абсцисс. Таким образом, в основе рис. 4*а* и *б* лежит одна и та же двумерная карта системы, состоящая из областей, заполненных делокализованными и локализованными состояниями, и пустых. На рис. 4*б* изображена соответствующая плотность состояний $g(E)$ при некоторых значениях параметра W/I (рис. 4*б* следует понимать как трехмерный, где вдоль третьей оси отложена величина $g(E)$).

Если $W/I = 0$, то беспорядок отсутствует, и мы имеем дело с идеальным кристаллом, обладающим металлической проводимостью.

В этом случае все состояния описываются делокализованными блоховскими функциями с одинаковыми амплитудами $|c_i|$. Соответствующие собственные значения определяются квазиволновым вектором \mathbf{q} и законом дисперсии $E(\mathbf{q})$; они занимают интервал энергий $-B/2 < E - \bar{E} < B/2$, где B – ширина разрешенной зоны [6, с. 20]. При наличии беспорядка ($W/I \neq 0$) выше и ниже зоны делокализованных состояний возникают локализованные состояния, число которых при $W/I \ll 1$ сравнительно невелико. При дальнейшем увеличении W/I возникает все больше локализованных *флуктуационных* состояний, а число делокализованных состояний уменьшается. В интервале значений $0 < W < W_c$ локализованные состояния сосуществуют с делокализованными. Однако по энергии эти два типа состояний разделены так называемыми *порогами (краями) подвижности*. При изменении W/I пороги подвижности на рис. 4а и б смещаются вдоль штриховых линий. Кривые плотности состояний $g(E)$ на рис. 4б схематически показывают, как меняются доли локализованных (заштриховано) и делокализованных состояний при увеличении W/I (полное число состояний при этом сохраняется). Пороги подвижности показаны в плотности состояний $g(E)$ на рис. 4б прямыми штриховыми линиями. Чем больше значение параметра W/I , тем уже область энергий $E - \bar{E}$ внутри исходной разрешенной зоны $-B/2 < E - \bar{E} < B/2$, которая соответствует делокализованным состояниям, и тем ближе пороги подвижности к центру зоны $E - \bar{E} = 0$. При *критическом* значении W_c/I локализованные состояния впервые появляются и в центре зоны (при $E = \bar{E}$, рис. 4а). Это означает, что *все* состояния в системе стали локализованными и дальнейшее увеличение W/I уже не приводит к качественным изменениям в структуре собственных состояний.

Задача. Уравнение движения для системы случайных осцилляторов с амплитудами v_i и собственными частотами ω_i имеет вид [6, с.16]:

$$\left(\omega_i^2 - \omega^2\right)v_i + \sum_{j(\neq i)} \Delta_{ij}v_j = 0, \quad (3.1')$$

где Δ_{ij} – константы связи между ближайшими осцилляторами. Пользуясь формальной аналогией между (3.1') и уравнением (3.1) для электронов, обсудить на основе рис. 4 андерсоновскую локализацию оптических фононов в системе осцилляторов с детерминированными константами $\Delta_{ij} \neq 0$ и случайными частотами ω_i .

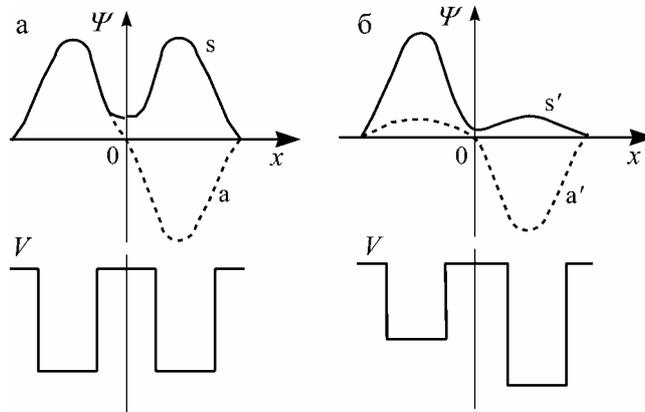


Рис. 5. Модель двух потенциальных ям: а – одинаковые ямы с симметричной (s) и антисимметричной (a) волновыми функциями; б – разные ямы.

Дадим качественную интерпретацию перехода Андерсона, имея в виду модель потенциальных ям, изображенную рис. 3. Рассмотрим фрагмент этой модели, состоящий только из двух соседних ям (рис. 5), которые в отсутствие взаимодействия (расстояние между ямами велико) имеют собственные энергии \tilde{E}_1 и \tilde{E}_2 и собственные функции φ_1 и φ_2 . Пусть теперь эти ямы помещены достаточно близко друг к другу, так что возникло перекрытие волновых функций φ_1 и φ_2 , мерой которого служит энергетический интеграл перекрытия I [6, с. 18]. При этом образуются гибридные электронные волновые функции

$$\Psi_1 = \alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2, \quad \Psi_2 = \beta\varphi_1 - \alpha\varphi_2, \quad (3.3)$$

которым соответствуют уровни энергии E_1 и E_2 . В случае одинаковых ям (рис. 5а), когда $\tilde{E}_1 = \tilde{E}_2$ (или $|\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2| \ll I$), имеем

в формуле (3.3)

$$\alpha = \beta = 1/\sqrt{2}, \quad E_2 - E_1 = 2I \quad (3.4)$$

(ср. с [8, § 50]). Таким образом, в случае совершенно одинаковых ям электронная волновая функция распределяется между ними поровну и электрон обобществляется обеими ямами.

В случае *разных* ям (рис. 5б), когда $|\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2| \gg I$, имеем

$$E_1 \approx \tilde{E}_1, \quad E_2 \approx \tilde{E}_2, \quad |E_1 - E_2| \gg I, \quad \beta/\alpha = I/|E_1 - E_2| \ll 1. \quad (3.5)$$

При учете последнего из этих неравенств выражения (3.3) показывают, что каждый электрон локализован преимущественно в своей яме и практически не ощущает присутствия другой ямы. Граница между рассмотренными предельными случаями одинаковых и разных ям (рис. 5а и б), определяется условием $|\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2| \sim I$.

Вернемся к модели Андерсона (рис. 3) и выделим в электронном спектре макроскопической системы случайных ям полосу энергий $-\Delta/2 < \varepsilon < \Delta/2$ с характерной шириной $\Delta \sim I$. Будем называть *резонансными* те ямы, энергии которых попадают в полосу Δ , и *нерезонансными* те, чьи энергии в эту полосу не попадают. Если две резонансные ямы являются ближайшими соседями, то они считаются *связанными* в том смысле, что электронное состояние обобществляется между ними. Это относится и к *кластерам* (cluster – гроздь), под которыми мы понимаем любые совокупности ям, связанных друг с другом либо непосредственно, либо через цепочку связанных ям. Волновая функция коллективизированного электрона в соответствии с (3.3), (3.4) должна иметь амплитуду одного порядка величины на всех ямах кластера. Заметим однако, что если для кластера, имеющего вид одномерной цепочки эквидистантно расположенных резонансных ям, делокализованные волновые функции электрона можно приближенно представлять себе как блоховские, то в общем случае это не так. Действительно, подавляющее большинство двумерных и трехмерных кластеров имеет апериодическую структуру, и это делает невозможным классификацию делокализованных состояний в них с помощью волнового вектора.

Если кластеры соответствуют электронным состояниям, коллективизированным всеми ямами данного кластера, то

нерезонансным ямам соответствуют не взаимодействующие друг с другом состояния разных ям. Они локализованы в этих ямах благодаря флуктуациям потенциала, которые входят в уравнение (3.1) через случайные величины E_i . Если выбросить из рассмотрения нерезонансные узлы, то размеры кластеров в системе будут определять протяженность волновой функции (радиус локализации) электронов в системе. Этот радиус существенно зависит от степени беспорядка. Уже отмечалось, что при $W/I=0$ модели (3.1) соответствует бесконечный кластер в виде правильной решетки резонансных узлов, в которой все состояния делокализованы. При $W/I \ll 1$ кластеры, состоящие из резонансных ям, еще имеют огромные размеры, но с ростом W/I их размеры уменьшаются, как и плотность случайного бесконечного кластера. Наконец, при критическом значении W_c/I параметра W/I система распадается на несвязанные конечные кластеры. Это соответствует переходу к локализованным волновым функциям электронов (андерсоновская локализация). При дальнейшем увеличении W/I размеры кластеров продолжают уменьшаться, но без качественных изменений в структуре собственных состояний в соответствии с результатами, показанными на рис. 4. Используя соотношение $I = B/(2z)$ (B – ширина зоны блоховских состояний при $W=0$, z – число ближайших соседей в случае периодической решетки), критерий андерсоновской локализации можно представить в виде: $W/B > 2zW_c/I$. Входящий сюда параметр $W/B \sim W/I$ указывает, что переход Андерсона определяется конкуренцией между кинетической энергией электрона и флуктуациями его потенциальной энергии, мерой которых являются B и W соответственно. Рост кинетической энергии способствует делокации электронов, а рост флуктуаций потенциального рельефа – локализации электронов под действием достаточно "мощных" ям. Андерсоновская локализация наступает тогда, когда роль флуктуаций потенциальной энергии становится подавляющей.

Известны и другие теоретические подходы к андерсоновской локализации. Один из них, сформулированный Ф. Андерсоном, связан с рассмотрением *нестационарного* поведения электрона. Зависящее от времени t уравнение Шредингера, соответствующее модели Андерсона (рис. 3), можно представить в виде [6, с.18]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_i(t) = E_i C_i(t) + \sum_{j(\neq i)} V_{ij} C_j(t) . \quad (3.6)$$

Здесь $C_i(t)$ амплитуда вероятности того, что в момент времени t электрон находится в i -й яме, а остальные величины имеют тот же смысл, что в (3.1). Предполагается, что вначале (при $t=0$) электрон находится в яме с номером $i=0$, т. е. $C_0(0)=1$ и $C_j(0)=0$ при $j \neq 0$. Из-за взаимодействия между соседними ямами, для которых $-V_{ij} = I \neq 0$, с течением времени электрон может переходить из одной ямы в другую. Как мы видели в модели двух ям (рис. 5), такой переход существенно облегчается, если ямы резонансные. Зависящая от времени вероятность того, что электрон находится в j -й яме определяется величиной $|C_j(t)|^2$. Главный интерес представляет поведение при $t \rightarrow \infty$ величины $|C_0(t)|^2$, характеризующей вероятность нахождения электрона в исходной яме $i=0$. Если величина $|C_0(t)|^2$ конечна при $t \rightarrow \infty$, то электрон остается вблизи исходного узла $i=0$ "навсегда", следовательно, состояние электрона с данной энергией E локализовано. В случае $|C_0(t)|^2 \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$ волновая функция электрона "расплывается" по всем ямам бесконечной системы, т. е. состояние электрона делокализовано.

Анализ этой задачи для модели Андерсона (рис. 3) показывает, что при $W/I \ll 1$ электрон совершает диффузионные случайные блуждания по связанным ямам. Расстояние r , на которое при диффузии электрон удаляется от исходной ямы (для нее $i=0$, $r=0$), растет со временем: $r \sim \sqrt{D \cdot t}$ (D – коэффициент диффузии), так что $r \rightarrow \infty$ и $|C_0(t)|^2 \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$. Однако если W/I превысит некоторую константу W_c/I , то диффузия становится невозможной, и движение электрона приобретает локализованный характер. В этом случае вероятность найти электрон на расстоянии r от исходной ямы $i=0$ от времени не зависит и определяется функцией вида $\exp(-2r/a)$, где a – радиус локализации, зависящий от энергии E .

Заметим, что андерсоновская локализация первоначально квазисвободного электрона при увеличении числа случайных рассеивателей на самом деле обусловлена процессами *квантовой интерференции* [16].

В *одномерной* бесконечной неупорядоченной системе все электронные состояния локализованы при наличии сколь угодно слабого случайного потенциала (при сколь угодно малом значении параметра W/I). Это утверждение можно считать доказанным теоретически для андерсоновской локализации как электронов, так и многих других типов элементарных возбуждений (фононов, экситонов, электромагнитных волн и т. д.) в одномерных неупорядоченных системах [10, 11]. Как следствие этого общего явления, в одномерно неупорядоченной системе статическая электропроводность или теплопроводность, обусловленная переносом энергии фононами, должны обращаться в нуль. В неодномерных системах андерсоновская локализация наступает, если параметр, характеризующий степень неупорядоченности системы, превышает некоторое критическое значение.

§ 4. Некоторые понятия, связанные с переходом Андерсона

А. Концепция порога подвижности. При рассмотрении перехода Андерсона (рис. 4), было введено понятие о пороге (крае) подвижности как о границе по энергии (или по параметру W/I), разделяющей локализованные и делокализованные состояния. Особое значение это понятие имеет для аморфных полупроводников, для которых типичная плотность электронных состояний $g(E)$ показана на рис. 6 в сравнении с кристаллом. Наличие ближнего порядка приводит к тому, что в плотности состояний аморфного полупроводника $g(E)$ можно выделить области, о которых в определенном смысле можно говорить как о разрешенных и запрещенных зонах. Аналогом запрещенной зоны кристалла, в которой нет никаких состояний, является *щель для подвижности* аморфного полупроводника, которая однако заполнена локализованными состояниями (заштриховано на рис. 6а). Разрешенные зоны в аморфном полупроводнике, как и в кристалле, заполнены делокализованными состояниями. Естественно, однако, что в функции $g(E)$ аморфного полупроводника отсутствует структура

(особенности Ван Хова), характерная для дальнего кристаллического порядка. Границы разрешенных зон, четко выраженные в кристаллах, в неупорядоченной системе оказываются размытыми из-за наличия в квазизапрещенной зоне *хвостов* плотности состояний. Эти хвосты принадлежат *флуктуационным уровням*, которые обусловлены случайными нарушениями структуры полупроводника.

Границами между локализованными и делокализованными состояниями служат пороги подвижности E_V и E_C , аналоги краев валентной зоны и зоны проводимости полупроводникового кристалла. Уровень Ферми находится в центре квазизапрещенной зоны (в области локализованных состояний). Поэтому перенос заряда возможен

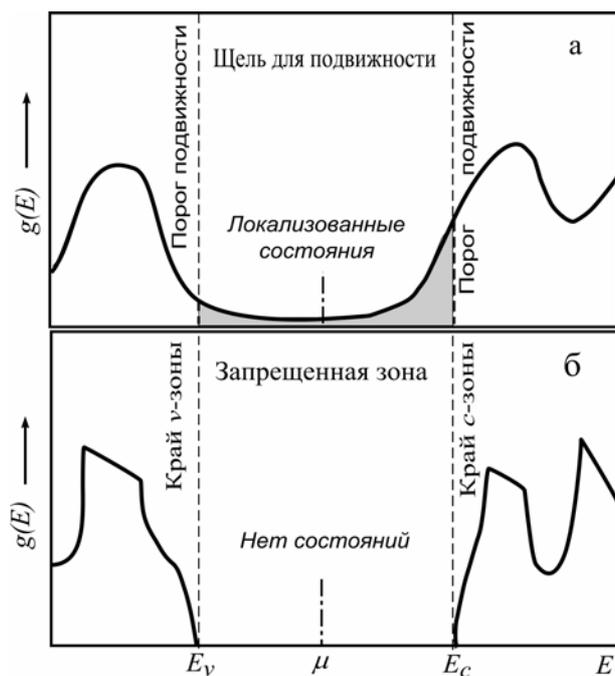


Рис. 6. Сравнение плотности состояний аморфного (а) и кристаллического (б) полупроводников. Затемнена область локализованных состояний.

только путем теплового заброса носителей в область делокализованных состояний или путем активированных перескоков носителей по слабо перекрывающимся локализованным состояниям (прыжковая проводимость [1, 6]). Ситуация, когда плотность состояний имеет вид, показанный на рис. 6а, а уровень Ферми лежит в области локализованных состояний, возможна также в сильно компенсированных легированных полупроводниках.

Основываясь на описанных представлениях, при обсуждении эксперимента в понятие "переход Андерсона" вкладывают также следующий смысл. Предположим, что в плотности электронных состояний $g(E)$ некоторого неупорядоченного образца имеется порог подвижности E_c , т. е. резкая граница по энергии между локализованными и делокализованными состояниями. Когда уровень Ферми μ лежит в области локализованных состояний, статическая проводимость системы при $T = 0$ равна нулю (диэлектрик), а когда μ лежит в области делокализованных состояний, проводимость при $T = 0$ имеет металлический характер. Если в образце менять заполнение состояний (или, что то же самое, положение уровня Ферми μ) с помощью внешнего электрического поля, давления и т. д., то в принципе можно достигнуть ситуации, когда уровень Ферми пройдет через порог подвижности E_c . Наблюдаемое при этом существенное изменение проводимости образца, связанное с изменением характера электронных состояний на уровне Ферми, часто называют переходом Андерсона (см., например, [1, 14]).

Задача. Электроны, образующие d -мерный однородный вырожденный электронный газ, могут двигаться в d измерениях. Показать, следуя [7, § 56], что плотность n такого электронного газа связана с волновым числом Ферми k_F соотношениями

$$n = \begin{cases} k_F^3 / (3\pi^2) & \text{при } d = 3, \\ k_F^2 / (2\pi) & \text{при } d = 2. \end{cases} \quad (4.1)$$

Б. Концепция минимальной металлической проводимости. Пусть уровень Ферми μ , непрерывно меняясь, приближается к порогу подвижности со стороны делокализованных состояний. Возникает важный вопрос: обратится ли электропроводность при нулевой

температуре в нуль скачком или непрерывно, если уровень Ферми пересекает порог подвижности E_c ? Точного ответа на этот вопрос до сих пор нет, однако наиболее правдоподобными для его решения считаются следующие соображения Н. Мотта, известные как концепция минимальной металлической проводимости [12]. Рассмотрим металлическое состояние, когда уровень Ферми находится внутри энергетической зоны делокализованных состояний (металл). Пусть в этих состояниях находятся квазисвободные электроны с концентрацией n , импульсом Ферми $\hbar k_F$ и временем релаксации импульса τ . Тогда электронная проводимость на постоянном токе выражается формулой (ср. с (2.13))

$$\sigma = e^2 n \tau / m = e^2 \ln / (\hbar k_F). \quad (4.2)$$

В случае трехмерного (3D) электронного газа подставим в (4.2) выражение $n^{(3D)} = k_F^3 / (3\pi^2)$ из (4.1) и учтем, что для реальных металлов $k_F \approx 1/a_0$, где a_0 – межатомное расстояние. Увеличение степени разупорядоченности (например, путем введения в металл примесей) приводит к усилению рассеяния электронов и уменьшению их длины свободного пробега l . Ключевым моментом в этом рассуждении является то, что величина l должна быть ограничена снизу, именно $l > 1/k_F$. Равенство по порядку величины, т. е.

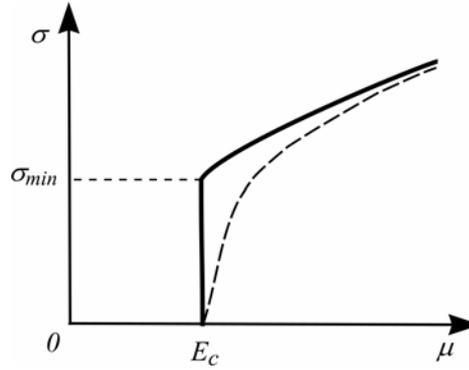


Рис. 7. Возможные зависимости проводимости σ от положения уровня Ферми μ вблизи порога подвижности E_c . Сплошная кривая соответствует существованию минимальной проводимости σ_{min} , штриховая – плавному изменению σ .

соотношение $l \sim 1/k_F$, выражает *критерий локализации Иоффе – Регеля*. Действительно, по своему физическому смыслу длина свободного пробега фермиевского электрона l не может быть меньше, чем длина соответствующей ему волны $\lambda_F \sim 1/k_F$ (обратное означало бы невозможность описать квазисвободный электрон как квантовую волну). С учетом приведенных выше оценок находим, что $lk_F \approx l/a_0 > 1$, при этом

$$\sigma^{(3D)} > \sigma_{\min}^{(3D)} = C_3 e^2 / (\hbar a_0), \quad (4.2)$$

где безразмерная константа $C_3 \approx 0,025 \div 0,1$ оценена численно [1, 13].

Таким образом, металлическая проводимость трехмерного электронного газа при наличии случайных рассеивателей имеет нижнюю границу (4.2), за которой следует переход к диэлектрической проводимости. Отсюда можно сделать вывод, что при увеличении беспорядка (при увеличении параметра W в модели Андерсона (3.1)) статическая проводимость при $T = 0$ должна уменьшаться до значения (4.2), а затем скачком обратиться в нуль. На рис. 7 показано такое поведение проводимости при изменении уровня Ферми μ , который пересекает порог подвижности E_c , двигаясь сверху. Физической причиной такого изменения проводимости при $\mu = E_c$ является попадание уровня Ферми в область локализованных состояний (переход Андерсона) после прохождения через порог подвижности.

Повторяя эти рассуждения для двумерного электронного газа (электроны могут двигаться только в плоскости), согласно (4.1) имеющего плотность $n^{(2D)} = k_F^2 / (2\pi)$, находим $\sigma^{(2D)} > \sigma_{\min}^{(2D)} = C_2 e^2 / \hbar$, где $C_2 = 0,12$ [14]. Замечательно, что $\sigma_{\min}^{(2D)}$ выражается только через фундаментальные размерные физические константы. Следует иметь в виду, что изложенные соображения основаны на одноэлектронном приближении и в них существенно использовалось отличие плотности состояний на уровне Ферми от нуля. Последнее условие может нарушаться, например, в сильно легированных полупроводниках с так называемой *кулоновской щелью* [1]; в таких случаях вопрос о минимальной металлической проводимости требует более тщательного рассмотрения.

§ 5. Переход Мотта

К переходам диэлектрик – металл относится также переход Мотта, параметром которого является среднее расстояние между атомами системы или примесными центрами. Этот переход связан с *многоэлектронными* эффектами, которые могут проявляться сходным образом в упорядоченных и неупорядоченных системах при изменении их плотности. Чтобы не усложнять обсуждение эффектами беспорядка, рассмотрим переход Мотта в модели периодической решетки, образованной атомами с одним валентным электроном. Пусть вначале расстояние между атомами (период решетки) R значительно превышает радиус волновой функции электрона a . Закон дисперсии для электрона в простой кубической решетке с векторами трансляций $\mathbf{R}_n = R(\mathbf{e}_x n_1 + \mathbf{e}_y n_2 + \mathbf{e}_z n_3)$ имеет вид [6, с. 20]:

$$E(\mathbf{q}) = \bar{E} - 2I \{ \cos(q_x R) + \cos(q_y R) + \cos(q_z R) \}. \quad (5.1)$$

Здесь \mathbf{q} – квазиволновой вектор,

$$I \equiv I(R) = I_0 \exp(-R/a) - \quad (5.2)$$

энергетический интеграл перекрытия волновых функций s -типа, принадлежащих соседним атомам, $|\bar{E}|$ – энергия связи электрона в состоянии изолированного атома с волновой функцией радиуса $a \sim \hbar / \sqrt{2m|\bar{E}|}$. Поскольку каждый атом отдает решетке один электрон, то энергетическая зона шириной $B = \max_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}) - \min_{\mathbf{q}} E(\mathbf{q}) = 12I$ образована N уровнями делокализованных (блоховских) состояний. В соответствии с принципом Паули в каждом блоховском состоянии, принадлежащем всем атомам кристалла, находятся два электрона с противоположными спинами, которые не взаимодействуют друг с другом (одноэлектронное приближение). Казалось бы, в этой модели при сколь угодно малом значении I в разрешенной зоне $N/2$ уровней должно быть заполнено N электронами с противоположными спинами, и проводимость при этом должна иметь металлический характер.

Однако, как было указано Н. Моттом, приведенное рассуждение, правильное для металлов с достаточно широкой зоной проводимости, оказывается неверным в случае больших расстояний между атомами

($R \gg a$), когда ширина разрешенной зоны $B = 12I$ очень мала, а эффективная масса электронов $m = \hbar / (2IR^2)$ велика. Действительно,

сделанный вывод о металлизации системы при любых R основывался на аргументации, принятой в одноэлектронном приближении, когда межэлектронное взаимодействие учитывается лишь частично в форме средней потенциальной энергии электрона, обусловленной действием всех других валентных электронов. Вместе с тем при бесконечно большом удалении атомов друг от друга электроны локализованы каждый на своем атоме и $I \rightarrow 0$ согласно (5.1). При больших, но конечных значениях $R \gg a$, когда $I \neq 0$, но зона (5.1) очень узкая, появляется вероятность того, что на одном атоме (узле решетки) окажутся два электрона с разными спинами. Если два электрона находятся на одном атоме, то между ними возникает кулоновское отталкивание, энергия которого $\sim U = e^2/a$ называется *корреляционной* энергией. Такое заселение состояний (два электрона на атоме) и межэлектронное взаимодействие не предусмотрены одноэлектронным приближением. Следовательно, последнее применимо, только если

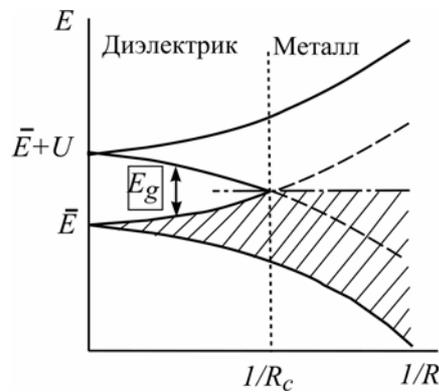


Рис. 8. Энергетические зоны в зависимости от обратного периода $1/R$ решетки атомов с одним валентным электроном. Слева от точки перехода $1/R_c$ — диэлектрик, справа — металл.

корреляционная энергия U становится пренебрежимо малой по сравнению с кинетической энергией блоховских электронов, которая равна по порядку величины ширине зоны $B \sim I$. Это условие, записанное с учетом (5.2) в форме

$$B(R) = 2zI(R) > e^2/a,$$

выполняется лишь при достаточно малых значениях R . В обратной ситуации, когда разрешенная зона узкая и

$$B(R) < e^2/a,$$

необходимо учитывать наличие у атома (при $R \gg a$) двух уровней \bar{E} и $\bar{E} + U$, возникающих вследствие корреляционного взаимодействия U (рис. 8). Существенно, что на каждом из этих уровней может находиться только один электрон. Из рис. 8 видно, что при уменьшении R (увеличении интеграла перекрытия (5.2)) каждый из этих уровней расщепляется в зону из-за обычного квантового туннелирования. В случае $B \ll U$ (большие расстояния между атомами) узкие разрешенные зоны разделены запрещенной зоной (рис. 8). Поскольку число мест для электронов в каждой из разрешенных зон равно числу узлов решетки N , нижняя зона полностью заполнена N электронами, а верхняя пуста, и мы имеем диэлектрик. Ширина запрещенной зоны обращается в нуль, и две разрешенные зоны сливаются, когда расстояние между атомами уменьшается до некоторого критического значения R_c , определяемого условием $B(R_c) \sim e^2/a$. При дальнейшем сближении атомов ($R < R_c$) зона (5.1) расширяется и заполняется электронами в соответствии со стандартной зонной схемой, характерной для зоны проводимости металлов. Пока нет строгого ответа на вопрос, плавно или резко по параметру R происходит описанный переход диэлектрик – металл. В легированных полупроводниках переход Мотта из диэлектрического в металлическое состояние при увеличении количества примеси может происходить при концентрациях примеси выше критической N_c . Как показывают эксперименты, хорошую оценку последней в случае сильно легированных полупроводников дает соотношение $N_c a^3 \approx 0,02$, где a – радиус примесного состояния [1].

Подводя итог, сравним переходы Мотта и Андерсона как две разновидности перехода диэлектрик – металл в электронной системе. Переход Андерсона возможен в *одноэлектронном* приближении и связан с *разупорядоченностью*. Существенно также подчеркнуть, что переход Андерсона не специфичен только для электронных возбуждений, а проявляется как обусловленный неупорядоченностью эффект локализации различных волн, включая классические волны (звуковые, электромагнитные и т. д.). В свою очередь, переход Мотта обусловлен *многоэлектронными* эффектами, которые существенно проявляются при изменении *плотности* системы. Для перехода Мотта беспорядок не играет критической роли, поэтому этот переход

возможен как в периодических, так и в неупорядоченных структурах.

Разную природу переходов Андерсона и Мотта удобно проиллюстрировать в модели квантовых ям такой, как показанная на рис. 3. В ней *переход Андерсона* определяется параметром W/I , где I считается заданной величиной, а W – разброс уровней в ямах случайной глубины. *Переход Мотта* появляется в модели одинаковых ям, расположенных периодически, а параметром перехода является величина $I/U \sim B/U$, в которой энергия корреляции постоянна: $U = e^2/a$. Существенно, что в оба параметра W/I и I/U входит интеграл переноса I , который согласно (5.2) является функцией среднего межатомного расстояния R или плотности системы $\sim R^{-3}$. Следовательно, если рассматривать изменение проводимости в зависимости от плотности атомов в системе, то могли бы проявиться оба перехода, но, скорее всего, при разной критической плотности. Это следует также из примера, который мы теперь рассмотрим.

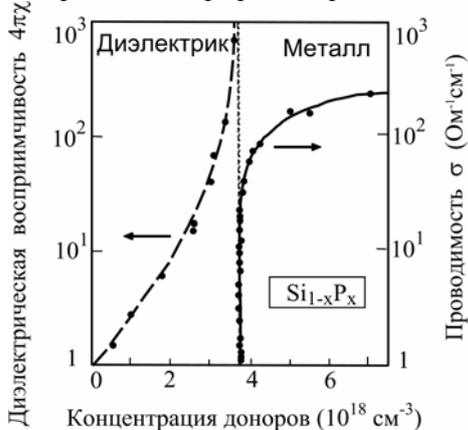


Рис. 9. Переход диэлектрик – металл при изменении концентрации N легирующих атомов P в кристалле Si при $T=10^{-2}$ К.

На рис. 9 представлены результаты эксперимента, показывающие переход от локализованных к делокализованным состояниям электронов в зависимости от концентрации атомов фосфора N , легирующего кристаллический кремний ($\text{Si}_{1-x}\text{P}_x$). В тетраэдрически координированном Si пятивалентные атомы P образуют мелкие уровни с боровским радиусом $\sim 30 \text{ \AA}$ под дном зоны проводимости. При низкой температуре ($T = 10^{-2} \text{ К}$)

и малой концентрации фосфора, соответствующей $x < 10^{-4}$, доноры не взаимодействуют друг с другом, и система ведет себя как диэлектрик (левая часть рис. 9). При повышении концентрации примеси

N электронные состояния начинают перекрываться и, наконец, при критическом значении $N_c = 3,7 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ($x_c = 7,5 \cdot 10^{-5}$) появляется ненулевая проводимость, имеющая металлический характер (правая часть рис. 9). Этот переход можно интерпретировать как переход Мотта в неупорядоченной системе, заключающийся в появлении проводимости при увеличении перекрытия между примесными центрами с повышением их плотности. Однако из рис. 9 видно, что проводимость системы σ , появляющаяся при $x > x_c$, возрастает непрерывно, и это не вполне согласуется с соображениями Мотта (рис. 7). Причиной может быть то, что при увеличении легирования не только уменьшается среднее расстояние между примесными центрами, что существенно для перехода Мотта, но и усиливается беспорядок, так как все большее число атомов примеси случайным образом располагается в решетке основного кристалла. Таким образом, переход диэлектрик – металл, представленный на рис. 9, обусловлен одновременным действием беспорядка и электрон-электронного взаимодействия, вызывающих соответственно переходы Андерсона и Мотта. Некоторые особенности перехода Андерсона, проявляющиеся "в чистом виде", будут описаны в следующей главе.

Глава 2. Теория перколяции

Теория перколяции (percolation – просачивание, фильтрация) объединяет широкий класс статистико-геометрических задач, которые первоначально были направлены на изучение путей протекания газа или жидкости по случайному лабиринту. В общем случае теория перколяции изучает свойства связности макроскопически большого числа элементов, связь между которыми носит случайный характер. Характер описываемого процесса перколяции (протекания) существенно иной, чем диффузия.

В физике идеи теории перколяции (теории протекания) оказались чрезвычайно плодотворными при описании критических (пороговых) явлений, для которых характерен резкий переход системы из одного состояния в другое при некотором критическом значении параметра, определяющего состояние системы. К таким явлениям относится рассмотренный в предыдущей главе переход Андерсона, фазовые переходы 2-го рода, например ферромагнитные переходы в

магнетиках и т. д. Применительно к электрическим свойствам неупорядоченных систем (в частности, к протеканию тока) наиболее разработана перколяционная теория аморфных и легированных полупроводников, а также смесей диэлектрика и металла [1].

§ 6. Решеточные задачи теории перколяции

А. Эксперимент. Наглядной иллюстрацией идеей теории перколяции может служить опыт с проводимостью металлических сеток, опубликованный в журнале *Physical Review* в 1974 году. Квадратная металлическая сетка включалась в электрическую цепь (рис. 10), и предварительно пронумерованные узлы сетки блокировались (разрезались) в последовательности, которая

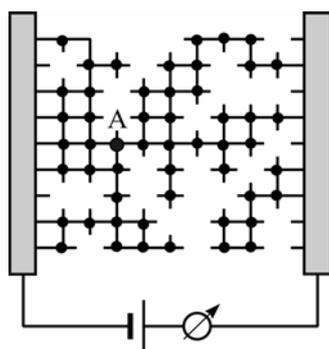


Рис. 10. Проводящая сетка со случайно блокированными узлами.

задавалась генератором случайных чисел. При увеличении числа блокированных (непроводящих) узлов к полному числу узлов N (последнее составляло $N = 137 \times 137$) для i -й сетки определялась относительная доля $x_i(N)$ неблокированных узлов, при которой ток в цепи прекращался (в изображенной на рис. 10 ситуации разрыв цепи произойдет после блокирования узла А). Опыт с сетками (полное их число

было Q) повторялся в одинаковых условиях, т. е. с одинаковыми сетками и с одним и тем же генератором случайных чисел. Конфигурация блокированных узлов менялась от сетки к сетке, и критическая доля $x_c(N)$ неблокированных узлов была случайной величиной. После Q испытаний среднее значение величины $x_c(N)$ и ее дисперсия, определяемые формулами

$$x_c(N) = (1/Q) \cdot \sum_{i=1}^Q x_i(N), \quad \{\delta(N)\}^2 = (1/Q) \cdot \sum_{i=1}^Q \{x_i - x_c(N)\}^2, \quad (6.1)$$

также являются случайными величинами. Их значения при большом числе опытов Q стремятся к своим постоянным пределам, испытывая все меньшие колебания (флуктуации). Чтобы сделать характеристики (6.1) независимыми от Q , число узлов N следует устремить к бесконечности. Тогда, как показывает теоретический анализ (см. § 7), среднеквадратичное отклонение уменьшается по закону

$$\delta(N) = C_2/N^{1/2\nu} \quad (6.2)$$

(где $C_2 \approx 0.54$ и $\nu \approx 1.3$) и стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$. В том же пределе величина

$$x_c = \lim_{N \rightarrow \infty} x_c(N), \quad (6.3)$$

уже не зависит от того, какая случайная конфигурация заблокированных узлов реализуется. Предельное значение (6.3) называется *порогом протекания*. Его универсальность связана с тем, что в бесконечной системе встречаются все возможные конфигурации заблокированных узлов. В частности, поэтому все бесконечные системы, различаясь конкретными конфигурациями заблокированных узлов, эквивалентны с точки зрения их статистических свойств. В них действует закон больших чисел, означающий что роль случайности тем меньше, чем больше число испытаний (опытов) или размер системы.

Б. Задачи теории перколяции на решетках. Рассмотрим *бесконечную* трехмерную (объемную) или двумерную (плоскую) решетку, заданную своими узлами. Отрезки между ближайшими узлами решетки назовем *связями*. Условимся, что по связям в обоих направлениях может беспрепятственно протекать жидкость, так что любой смоченный узел мгновенно смачивает все другие узлы. Если ввести каким-либо способом случайные элементы (узлы или связи) такой решетки, то мы приходим к решеточным задачам связей (*b – bond*) или узлов (*s – site*) теории перколяции.

Задача связей (рис. 11а) предполагает, что все узлы целые, а каждая связь может быть либо целой, либо разорванной независимо от состояния других связей. Относительная доля (концентрация) целых связей в решетке равна x , а разорванных $1-x$ и от времени не зависит. Другими словами, в бесконечной решетке x равно вероятности того, что данная связь – целая. При $x < 1$ каждый узел

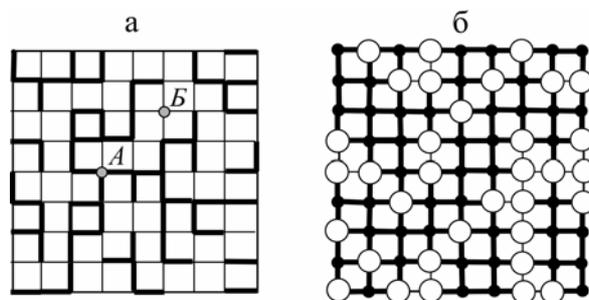


Рис. 11. Решеточные задачи (а) связей (жирными линиями показаны целые связи) и (б) узлов (черными кружками отмечены неблокированные узлы). Жирными линиями на рис. а и б выделены пути протекания.

решетки может смочить либо бесконечное, либо конечное число узлов решетки. Конкретная конфигурация смоченных узлов зависит от доли x целых связей в решетке, но в силу случайного расположения целых и разорванных связей важное значение мог бы иметь и выбор исходного узла (например, на рис. 11а узел A смачивает много узлов, а узел B – ни одного).

Чтобы избежать такой зависимости от выбора исходного узла, задачу ставят следующим образом: какова при заданном x вероятность $P^{(b)}(x)$ того, что произвольно выбранный узел смачивает бесконечное число узлов? В бесконечной решетке эта вероятность не может зависеть от конкретной реализованной конфигурации целых и разорванных связей, а зависит только от x и типа решетки. На рис. 12а показаны функции $P^{(b)}(x)$ для задачи связей, полученные путем численного моделирования (методом Монте-Карло [1, 2]). Зависимости $P^{(b)}(x)$ имеют качественно одинаковые особенности для решеток разной конфигурации и размерности. При $x \ll 1$, когда доля целых связей в решетке мала, жидкость не может уйти далеко от исходного узла, поэтому $P^{(b)}(x) = 0$. При $x \rightarrow 1$ почти все связи

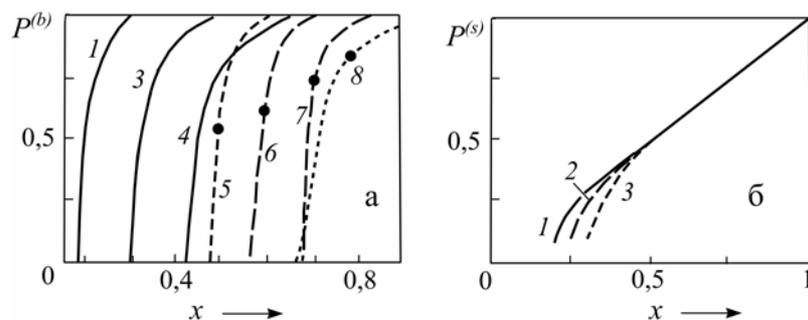


Рис. 12. Вероятности $P^{(b)}(x)$ для задачи связей (а) и $P^{(s)}(x)$ для задачи узлов (б). Кривые относятся к следующим решеткам: 1 – границентрированная кубическая (гексагональная плотноупакованная), 2 – объемноцентрированная кубическая, 3 – простая кубическая, 4 – алмаза, 5 – треугольная, 6 – квадратная, 7 – шестиугольная, 8 – ориентированная квадратная. Черными кружками помечены кривые для двумерных решеток.

целые и поэтому $P^{(b)}(x) \rightarrow 1$. Важнейшее значение имеет понятие о *пороге протекания* (ср. с формулой (6.3)). Под ним понимается *критическая* доля целых связей $x_c(b)$, являющаяся верхней границей значений x , для которых $P^{(b)}(x) = 0$. При $0 < x - x_c \ll 1$, т. е. в узком интервале значений x выше порога протекания, $P^{(b)}(x) \sim (x - x_c)^\beta$, где $0 < \beta < 1$ – критический индекс, зависящий от размерности решетки. Подчеркнем, что существование определенного значения x_c обусловлено именно тем, что рассматривается бесконечная решетка, в которой все реализации целых связей эквивалентны. С бесконечностью решетки связано и указанное выше неаналитическое поведение функции $P^{(b)}(x)$ выше критической точки x_c .

Задача узлов (рис. 11б) предполагает, что все связи целые, а узлы портятся случайным образом. А именно каждый узел может быть либо неперекрытым, либо перекрытым (блокированным). Перекрытые

узлы (белые кружки на рис. 11б) не смачиваются и не смачивают других узлов, т.е. они не пропускают жидкость ни в каком направлении. Пусть в бесконечной решетке относительная доля непокрытых узлов равна x , а покрытых $1-x$. При этом задача узлов ставится следующим образом: какова вероятность $P^{(s)}(x)$ того, что при заданном значении x произвольный узел смачивает бесконечное число узлов? Численное моделирование дает зависимости $P^{(s)}(x)$, показанные на рис. 12б для трехмерных решеток разной конфигурации. Функции $P^{(s)}(x)$ имеют те же качественные особенности, что $P^{(b)}(x)$. Главным из них является наличие *порога протекания* $x_c(s)$, т.е. верхней границы значений x , для которых $P^{(s)}(x) = 0$ в бесконечной решетке. Кроме того, $P^{(s)}(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow 0$ и $P^{(s)}(x) \rightarrow 1$ при $x \rightarrow 1$. Однако кривые на рис. 12 а и б имеют и некоторые различия, связанные с использованием разных моделей случайных элементов решетки. Перколяционные задачи обоих типов, направленные на определение порога протекания, можно сформулировать еще и в следующей общей форме: какая минимальная относительная доля $1-x$ связей (узлов) должна быть перекрыта, чтобы на бесконечной решетке не существовало проходящих сквозь нее бесконечных путей протекания?

Найденные методами численного моделирования пороги протекания в задачах связей $x_c(b)$ и узлов $x_c(s)$ для решеток разной

Таблица 1. Пороги протекания для задач связей и узлов на двумерной и трехмерной решетках

Тип решетки	$x_c(b)$	$x_c(s)$
Квадратная, $d=2$	0,50	0,59
Простая кубическая, $d=3$	0,25	0,31

размерности сравниваются в табл. 1. Из нее видно, что для обеих задач в трехмерной решетке пороги протекания ниже, чем в соответствующей двумерной решетке (ср. результаты для кубической и квадратной решеток). Это понятно: исчезновение протекания в некоторой плоскости трехмерной решетки не означает исчезновения протекания вообще, так как для трехмерной перколяции имеются "обходные пути" по другим плоскостям решетки. По той же причине среди решеток одной размерности более низким порогом протекания обладают те, что характеризуются большим числом ближайших соседей. Например, результаты численного моделирования дают следующие простые аппроксимации для порогов протекания в решетках разной размерности d [1, 3]:

$$x_c(b) = \frac{d}{d-1} \frac{1}{Z} \sim \frac{1}{Z}, \quad x_c(s) = \frac{\theta_c}{f} \sim \frac{1}{f}. \quad (6.4)$$

Здесь Z – число узлов в первой координационной сфере решетки, f – относительная плотность упаковки (т. е. доля объема, занятая шарами, по отношению к общему объему структуры при условии, что радиус шаров равен половине расстояния между ближайшими соседними узлами). Из расчетов найдено, что $\theta_c \approx 0,45$ для двумерных и $\theta_c \approx 0,15$ для трехмерных решеток. Различие перколяции по связям и узлам обусловлено тем, что в первом случае все определяется соединением ближайших целых связей, а во втором – ближайших неблокированных узлов. Существует теорема, согласно которой для любой решетки

$$x_c(b) \leq x_c(s), \quad (6.5)$$

т. е. порог протекания по связям не может превышать порога протекания по узлам. Интуитивно это понятно: блокирование узла эквивалентно разрыву не одной, а *всех* связей, выходящих из этого узла. Как следствие, чтобы прекратить протекание (достигнуть порога протекания со стороны больших значений x), требуется существенно меньшая доля $1 - x_c(s)$ блокированных узлов, чем доля $1 - x_c(b)$ разорванных связей.

Задача. В рамках модели узлов (рис. 11б) показать, что для квадратной решетки (рис. 10) с числом узлов $N = 2 \times 2 = 4$ величины (6.1) равны $x_c(4) = 5/12 \approx 0,42$ и $\delta(4) = \sqrt{2}/12 \approx 0,12$ (решение задачи

см. в [2, с. 25]). Заметим, что это значение $x_c(4)$ сильно отличается от $x_c(s) = 0,59$, полученного для бесконечной квадратной решетки (табл. 1). Решите эту задачу для решетки с числом узлов $N = 3 \times 3$.

Обсуждение общих результатов для решеточных задач закончим двумя замечаниями. Во-первых, обратим внимание на то, что кривая 8 на рис. 12а для задачи связей относится к *ориентированному* протеканию. Последнее означает, что в решетке задано некоторое направление \mathbf{F} (например, по диагонали квадрата на рис. 11а), а вероятность протекания по любой связи зависит от ориентации направления протекания \mathbf{b} относительно \mathbf{F} . Вероятность может быть существенно больше для протекания вдоль \mathbf{F} , когда $(\mathbf{F} \cdot \mathbf{b}) > 0$, чем для протекания в противоположном направлении, когда $(\mathbf{F} \cdot \mathbf{b}) < 0$. Введенное ограничение в случае ориентированного протекания приводит к существенному повышению порога x_c по сравнению с неориентированным протеканием в той же самой решетке (ср. кривые 6 и 8 на рис. 12а). В случайных проволочных сетках ориентированное протекание можно связать с направленным дрейфом носителей при приложении внешнего поля или с включением в случайные связи выпрямляющих диодов, которые пропускают ток преимущественно в одном направлении. Во-вторых, отметим, что для одномерных систем представление о протекании не имеет смысла. Действительно, появление хотя бы одного заблокированного узла или одной разорванной связи в одномерной решетке приводит к ее разрыву, причем обход заблокированной области исключен. По этой причине в одномерной случайной цепочке невозможно образование бесконечного кластера, и для нее имеем тривиальный результат: $x_c \rightarrow 1$.

§ 7. Перколяционные кластеры

В физических приложениях перколяционные задачи связей и узлов удобно формулировать в терминах статистики *кластеров*. Сформулируем на этом языке задачу узлов. Пусть доля x узлов (бесконечной) решетки выкрашена в черный цвет, а $1 - x$ – в белый. Два черных узла будем называть *связанными*, если они являются ближайшими соседями. Назовем *кластером* совокупность черных

узлов, связанных друг с другом непосредственно или через цепочку связанных друг с другом других черных узлов (фрагменты структуры кластеров, образованных черными узлами, можно видеть на рис. 11б).

Рассмотрим, как меняется конфигурация кластеров при увеличении x . При малых x все кластеры невелики (вероятность образования большого кластера пренебрежимо мала). С ростом x средний размер кластеров увеличивается сначала за счет возникновения новых малых кластеров, а затем и присоединения к кластерам других черных узлов. При $x > x_c$ впервые возникает *бесконечный кластер*, который проходит через всю решетку. Принято считать, что в решетке существует только один бесконечный кластер: два бесконечных кластера, проходящих через всю систему, должны где-то соединиться друг с другом. Теперь можно проинтерпретировать вероятность $P^{(s)}(x)$ (рис. 12б) как характеристику бесконечного кластера. Именно поскольку только в бесконечном кластере каждый узел может смачивать бесконечное число узлов, то считается, что вероятность $P^{(s)}(x)$ равна отношению числа узлов бесконечного кластера к полному числу узлов решетки.

Бесконечный кластер можно вообразить себе в виде случайной сетки, геометрия которой представлена на рис. 13 в значительно большем масштабе, чем расстояние между узлами перколяционной решетки. Эта сетка пронизывает все пространство, и в ее ячейках помещаются изолированные кластеры конечного размера, не связанные с бесконечным кластером. В структуре самого бесконечного кластера выделяют *скелет* и *мертвые концы*. Считается, что точка принадлежит скелету бесконечного кластера, если из нее, начав движение по цепочке связанных узлов в любом из двух направлений, можно уйти на бесконечность (точка I на рис. 13а). Если из точки можно уйти на бесконечность, двинувшись только в одном направлении, то она принадлежит мертвому концу (точка II на рис. 13а).

Основной характеристикой бесконечного кластера, зависящей от концентрации черных узлов x , является характерный размер $R(x)$ его ячеек, который называется *радиусом корреляции*. При $x \approx 1$, или $1 - x \ll 1$, радиус корреляции практически совпадает по порядку величины с периодом перколяционной решетки l . При приближении

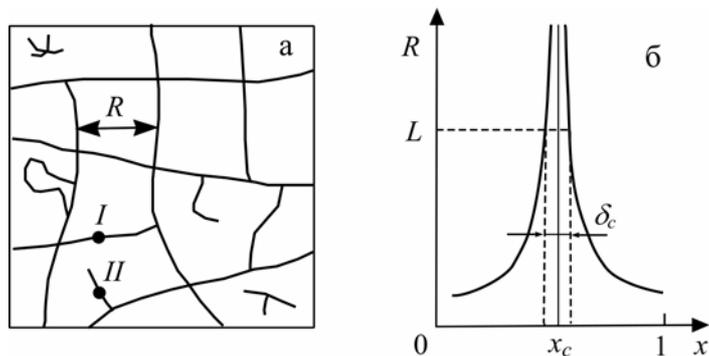


Рис. 13. а – Фрагмент бесконечного кластера. б – Радиус корреляции $R(x)$. На рис. а схематически изображены цепочки черных узлов при таком разрешении, когда дискретная структура решетки сглажена. Показаны скелет бесконечного кластера, мертвые концы и изолированные конечные кластеры.

к порогу протекания x_c сверху (при $0 < x - x_c \ll 1$) радиус корреляции резко возрастает, подчиняясь характерному для критических явлений степенному закону

$$R(x) = l |x - x_c|^\nu, \quad (7.1)$$

где критический индекс ν положителен. Представление о радиусе корреляции применимо и ниже порога перколяции ($x < x_c$), где существование бесконечного кластера невозможно. Смысл величины R в этой области заключается в том, что она определяет *максимальный размер конечных кластеров*. Если $x \rightarrow x_c$ снизу, то для радиуса корреляции также справедлива формула (7.1), показывающая резкое увеличение среднего размера конечных кластеров при приближении к критической точке x_c . Приведенные рассуждения относятся как к плоским, так и к пространственным кластерам. Роль размерности заключается только в том, что входящий в формулы (6.2) и (7.1) критический индекс радиуса корреляции ν для систем разной размерности имеет различные значения: $\nu = 1,33$ для плоской ($d = 2$) задачи и $\nu = 0,8 \div 0,9$ для объемной ($d = 3$), причем эти значения практически не зависят от типа решетки.

Как уже отмечалось в связи с формулой (6.3), понятие о детерминированном пороге протекания x_c имеет смысл только для бесконечной системы. Для решетки с конечным числом узлов N согласно (6.1) $x_c(N)$ является случайной величиной. Она распределена в критической области, ширина которой (дисперсия $x_c(N)$) уменьшается при увеличении N , стремясь к нулю при $N \rightarrow \infty$. Смысл этого перехода удобно пояснить с помощью рис. 13б. В d -мерном пространстве "куб", имеющий длину ребра $L = lN^{1/d}$, наложим на некоторый участок бесконечного кластера (рис. 13а) с корреляционным радиусом (7.1). Помещая такой куб в разные части бесконечного кластера, можно перебрать все возможные конфигурации не заблокированных узлов в кубе заданного размера. Рассмотрим протекание с одной грани куба на противоположную в направлении, перпендикулярном этим граням. Число ячеек бесконечного кластера вдоль ребра куба равно $L/R(x)$. В случае $L/R \gg 1$, как на рис. 13а, таких ячеек много, и протекание безусловно существует. Однако при условии $R/L \gtrsim 1$ (характерный размер ячейки становится больше, чем длина ребра куба) протекание через куб может исчезнуть. Указанному условию соответствует интервал значений x шириной δ_c вблизи x_c (рис. 13б), причем $R(x_c \pm \delta_c/2) \sim L$. Учитывая в этой оценке выражение (7.1) и $L = lN^{1/d}$, находим, что для d -мерного кластера размер критической области зависит от числа узлов системы следующим образом: $\delta_c(N) \approx C_d / N^{1/(vd)}$, где $C_d \sim 1$. В случае плоской решетки ($d = 2$) это выражение принимает вид (6.2).

На рис. 14 сравниваются результаты численного расчета основных характеристик перколяционных кластеров для задачи связей в квадратной (двумерной) решетке. Функция $P(x)$, зависящая от доли целых связей x , имеет тот же смысл, что введенная выше функция $P^{(b)}(x)$ для бесконечных решеток: она определяет долю связей, принадлежащих пути протекания (бесконечному кластеру). Зависимость среднего размера кластеров $s(x)$ от x при $x < x_c$ хорошо коррелирует с радиусом $R(x)$, качественно изображенным на

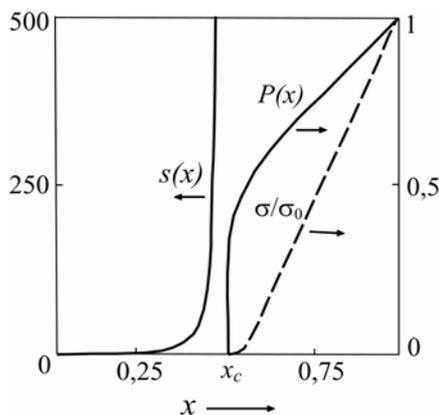


Рис. 14. Характеристики кластеров в квадратной решетке в зависимости от доли целых связей x : $s(x)$ – средний размер конечных кластеров, $P(x)$ – вероятность образования бесконечного кластера, σ/σ_0 – макроскопическая проводимость бесконечного кластера.

формулами (3.3) – (3.5). Резонансным потенциальным ямам поставим в соответствие совокупность черных узлов бесконечной решетки, а нерезонансным – совокупность белых узлов. Тогда долю x черных узлов можно отождествить с долей резонансных ям, которая равна I/W . Андерсоновская локализация заключается в переходе от делокализованных состояний к локализованным при увеличении параметра W/I (при уменьшении доли резонансных ям I/W). В теории перколяции этому соответствует переход (при уменьшении x) от бесконечного кластера черных узлов (связанных ям), по которым возможно прохождение электронов через всю систему, к совокупности конечных черных кластеров, представляющих локализованные состояния. Этот переход соответствует прохождению порога протекания x_c при уменьшении x в задаче узлов. Соответствующее условие имеет вид $I/W_c = x_c(s)$, а значение $x_c(s)$ приведено в

рис. 13б. Наконец, $\sigma(x)$ определяет наблюдаемую макроскопическую проводимость сетки случайных связей, для которой $\sigma(x) = 0$ при $x < x_c$ и $\sigma(x) \sim (x - x_c)^t$ при $0 < x - x_c \ll 1$, где $t > 1$.

В качестве одного из физических приложений результатов теории перколяции оценим критическую величину связанного с беспорядком параметра W/I , необходимую для перехода Андерсона (§ 3). Представим себе систему потенциальных ям (рис. 3), определенных

табл. 1. Более точно условие перехода Андерсона выражается формулой $W_c/I = 4/x_c(s)$ [1], которая учитывает ширину полосы резонансных состояний. Эта формула хорошо согласуется с результатами расчетов величины W_c/I , в которых не используются перколяционные соображения.

В задачах связей и узлов на решетках предполагается наличие только двух возможных состояний случайных элементов одного или другого типов. Протекание между далекими узлами осуществляется по цепочкам, которые получаются в результате связывания ближайших соседних элементов решетки. Для описания путей распространения электронов в неупорядоченных системах чаще используются некоторые другие (нерешеточные) модели протекания, которые рассматриваются в следующих двух параграфах.

§ 8. Задачи на случайных узлах

Случайные узлы – это изолированные точки пространства, распределенные стохастически, причем задано их среднее число в единице объема (концентрация N). Пусть заданы некоторая функция $\xi(\mathbf{r})$ и величины $\xi_{ij} = \xi(\mathbf{r}_{ij})$, выраженные через $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, где \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j – радиусы-векторы узлов i и j . Два узла считаются *связанными*, если выполнено некоторое условие *связности*, например, неравенство $\xi_{ij} < \xi'$, в котором ξ' – заданное число. Если два случайных узла связаны друг с другом непосредственно или через цепочку связанных узлов, то они принадлежат одному кластеру. Задача заключается в нахождении порога протекания ξ_c , или нижней границы значений ξ' , при которых еще существует бесконечный кластер.

В качестве простейшего условия связности можно использовать неравенство $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < r$, которое выполняется, если узел j (i) находится внутри шара (круга в двумерном случае) радиуса r с центром в узле i (j). При этом требуется найти минимальное значение радиуса r (порог протекания r_c), при котором существует бесконечная цепочка таких узлов, что каждый последующий узел лежит внутри сферы радиуса r_c с центром на предыдущем узле.

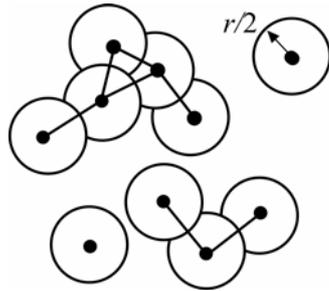


Рис. 15. Построение перекрывающихся окружностей (сфер) в задаче случайных узлов. Прямые линии соединяют попарно связанные узлы, которые образуют кластеры.

Такое построение соответствует *охватывающим* сферам. Рис. 15 иллюстрирует построение *перекрывающихся* сфер (окружностей): в этом случае строятся сферы радиуса $r/2$ с центрами на случайных узлах, причем связанными считаются те узлы, для которых сферы радиуса $r/2$ перекрываются. Кластеры, образованные перекрывающимися окружностями (сферами), показаны на рис. 15. Очевидно, что перекрывающимся сферам удобно поставить в

соответствие перекрывающиеся электронные волновые функции локализованных состояний, характерные, в частности, для примесных атомов в легированных полупроводниках.

Задача. Для узлов, изображенных на рис. 15, построить систему охватывающих сфер радиуса r . Совпадают ли кластеры в построениях охватывающих и перекрывающихся сфер?

Порог протекания r_c , т. е. минимальный радиус равновеликих охватывающих сфер, при котором образуется бесконечный кластер из таких сфер, называется *перколяционным радиусом*. Он зависит от средней концентрации узлов N и связан с пороговым значением $B_c = (4\pi/3)Nr_c^3$ параметра $B = (4\pi/3)Nr^3$. Параметр B определяет среднее число узлов внутри шара радиуса r или количество связей, образованных центральным узлом со своими соседями, находящимися внутри этого шара. Путем численного моделирования в модели случайных узлов получены значения $B_c \approx 4$ для двумерных (окружности) и $B_c \approx 3$ для трехмерных (сферы) систем. Этот результат качественно согласуется с выводами решеточных моделей (табл. 1) о том, что пороги протекания в двумерных системах выше,

чем в соответствующих трехмерных.

§ 9. Континуальные модели

Рассмотрим теперь непрерывную случайную функцию $V(\mathbf{r})$ радиуса-вектора \mathbf{r} (случайное поле). При заданном значении E точки пространства, удовлетворяющие условию

$$V(\mathbf{r}) \leq E, \quad (9.1)$$

покасим черным, а все остальные – белым. При увеличении E относительная доля черных областей в объеме системы Ω , т. е.

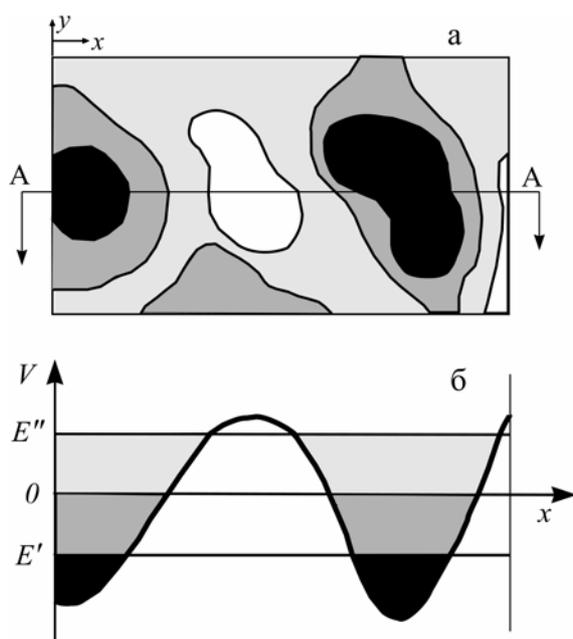


Рис. 16. а – Изоэнергетические контуры двумерной функции потенциальной энергии электрона $V(x, y)$. б – Разрез потенциального рельефа $V(x, 0)$ плоскостью А – А, показывающий области локализованных состояний при разных энергиях E .

$$\Theta(E) = \int_{\Omega} \frac{d^3r}{\Omega} \mathcal{G}[E - V(\mathbf{r})] \quad (9.2)$$

увеличивается от нуля при $E = -\infty$ до единицы при $E \rightarrow \infty$ (здесь $\mathcal{G}(x) = 0$, если $x < 0$, и $\mathcal{G}(x) = 1$, если $x > 0$). Перколяционная задача заключается в нахождении минимального значения (нижней границы) E_c значений E , при котором из любой точки "черного" пространства, не выходя за его пределы, можно уйти на бесконечность. Величина E_c называется *уровнем протекания*.

Для электронов картина сформулированного перколяционного перехода наглядно описывается в рамках *квазиклассического* приближения. Действительно, рассмотрим электрон с заданной полной энергией E , который находится в случайном поле потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$. С этой точки зрения неравенство (9.1) можно рассматривать как условие, определяющее, какие пространственные области доступны для движения электрона как классической частицы для конкретной реализации поля потенциальной энергии $V(\mathbf{r})$.

Пусть случайная функция $V(\mathbf{r})$ удовлетворяет условию (1.2), а ее среднее значение выбрано равным нулю во всех точках \mathbf{r} :

$$\langle V(\mathbf{r}) \rangle = \langle V(0) \rangle = 0. \quad (9.3)$$

При этом задача теории перколяции сводится к изучению геометрии (связности) области, допустимой для классического (не квантового) движения электрона в потенциальном рельефе $V(\mathbf{r})$. Конфигурация классически доступной области существенно зависит от энергии электрона E . Это видно из рис. 16а, где для некоторой реализации двумерного потенциала $V(\mathbf{r}) = V(x, y)$ изображены изоэнергетические контуры, удовлетворяющие условию $V(x, y) = E$ и ограничивающие движение электрона при нескольких значениях E . На рис. 16б показаны изменение потенциала $V(x, 0)$ вдоль оси x и соответствующие области локализации электрона.

В общем случае электрон с энергией E , незначительно превышающей $\min V(\mathbf{r})$, может находиться только в самых глубоких минимумах потенциального рельефа. Этим минимумам соответствуют в пространстве лишь небольшие "черные" области с малым

относительным объемом (площадью), в которых может локализоваться электрон. При дальнейшем увеличении E размеры "черных" областей, классически разрешенных для движения электрона, увеличиваются. Наконец, при некотором значении $E = E_c$, причем $E_c < \max V(\mathbf{r})$, появляются бесконечные "черные" пути, по которым "классический" электрон может перемещаться по всему пространству. Это означает, что при энергиях $E > E_c$ движение электрона становится делокализованным. Заметим, что описанная здесь картина возникновения бесконечной классически допустимой области в двумерной перколяционной модели (рис. 16) может служить еще одной наглядной интерпретацией перехода Андерсона локализация \rightarrow делокализация при увеличении энергии электрона E (§ 3). Этот переход происходит при некотором значении $\Theta_c = \Theta(E_c)$ из (9.2), соответствующем переходу через уровень протекания E_c .

Установим соответствие между континуальной задачей (рис. 16) и задачей узлов на решетке (рис. 11б). Для этого на картину черных и белых областей (рис. 16а), представляющую при заданном E некоторую реализацию $V(x, y)$, мысленно наложим плоскую решетку, период которой мал по сравнению с корреляционным радиусом потенциала $V(x, y)$ (размером черных областей). Назовем черными узлы решетки, оказавшиеся в черных континуальных областях, а белыми – узлы, оказавшиеся в белых областях. Полученные белые и черные узлы решетки группируются в кластеры, однако эти кластеры отличаются от рассмотренных в решеточной задаче узлов (§ 6): теперь большие массивы узлов решетки в пределах однородно окрашенной области коррелированы по цвету в соответствии с функцией $V(\mathbf{r})$.

В силу условия (9.3), означающего трансляционную инвариантность потенциала $V(x, y)$ в среднем, усреднению по объему системы (1.5) эквивалентно усреднение по ансамблю реализаций потенциала V в любой точке с помощью плотности вероятности распределения потенциала $F(V)$. При таком усреднении доля черных узлов в системе выражается функцией распределения

$$x = \Theta(E) = \int_{-\infty}^E dV F(V) . \quad (9.4)$$

При этом уровень протекания E_c в континуальной задаче и порог

протекания x_c в соответствующей задаче узлов связаны условием

$$x_c = \Theta_c = \int_{-\infty}^{E_c} dV F(V), \quad (9.5)$$

которое следует из (9.4) при $E = E_c$. Заметим для примера, что в легированных полупроводниках с большой концентрацией примесных атомов функция $V(\mathbf{r})$ представляет собой случайный потенциал, создаваемый флуктуациями распределения заряженных примесей (см. § 10). Такая функция обладает свойствами гауссова случайного поля, для которого в формулах (9.4) и (9.5)

$$F(V) = \left(2\pi\langle V^2 \rangle\right)^{-1/2} \exp\left[-V^2/2\langle V^2 \rangle\right]. \quad (9.6)$$

Задача (9.2) или (9.5) в случае двумерной функции $V(\mathbf{r}) = V(x, y)$ имеет точное решение. Если случайная функция $V(x, y)$ удовлетворяет условию (9.3), то топологические свойства черных областей, разрешенных для классического движения, и белых (запрещенных) областей обладают симметрией по E относительно значения $E = 0$. Это означает, что для любой реализации картины черных областей при некотором значении $E = E_1$ имеется такая же реализация картины белых областей при $E = -E_1$. Как следствие, в двумерной задаче одновременное протекание по черным и белым областям невозможно. Действительно, определим функцию $V(x, y)$ внутри некоторого большого квадрата и рассмотрим образование непрерывного пути протекания между противоположными сторонами этого квадрата. Ясно, что двумерное протекание по черному слева направо означает отсутствие протекания по белому сверху вниз и наоборот. Таким образом, протекание по областям одного цвета возникает при том же значении E , при котором исчезает протекание по областям другого цвета. На пороге протекания площадь распределена поровну между белым и черным, т. е. $\Theta_c = 1/2$, причем в силу свойства (9.3) это происходит при $E = E_c = 0$. Для нормального распределения (9.6) эти результаты следуют непосредственно из (9.5).

Заметим, что полученное в двумерной континуальной задаче узлов значение $\Theta_c = 0,5$ не совпадает с результатом решеточной задачи узлов $x_c(s) = 0,59$, приведенным в табл. 1 (§ 6). Это различие

связано с наличием конечного радиуса корреляции у потенциала $V(\mathbf{r})=V(x,y)$, в то время как в решеточных задачах корреляция между соседними узлами отсутствует. Теоретически было прослежено [2], что при уменьшении радиуса корреляции в континуальной задаче до величины периода перколяционной решетки критическое значение Θ_c действительно стремится к значению $x_c(s)=0,59$. Для трехмерных задач с $V(\mathbf{r})=V(x,y,z)$ одновременное протекание по черному и белому не исключено из-за наличия "развязок", проходящих на разных уровнях по третьей координате. Поэтому в континуальной задаче относительный объем черных областей на уровне протекания $E_c = 0$ (при условии (9.3)) составляет $\Theta_c \approx 0,17$.

Глава 3. Плотность примесных состояний в сильно легированных полупроводниках

§ 10. Особенности энергетической структуры легированных полупроводников

Условие *сильного легирования* $N_0 a^3 \gg 1$ (N_0 – средняя по образцу концентрация примеси, a – борковский радиус примесного состояния) означает, что волновая функция одного примесного центра перекрывается с волновыми функциями многих других примесных центров. На рис. 17 сравниваются энергетические диаграммы сильно легированных слабо компенсированного (рис. 17б) и сильно компенсированного (рис. 17в) полупроводников n -типа с аналогичной диаграммой слабо легированного полупроводника (рис. 17а). Для последнего случая, соответствующего условию $N_0 a^3 \ll 1$, характерно образование примесной зоны вследствие уширения локальных уровней [6, § 9]. При сильном легировании ($N_0 a^3 \gg 1$) значительное перекрытие волновых функций примесных центров приводит к тому, что примесная зона сливается с ближайшей к ней разрешенной зоной основного кристалла: донорная зона сливается с зоной проводимости, а акцепторная – с валентной зоной. В результате область разрешенных значений энергии проникает в глубь запрещенной зоны кристалла, как это показано для случая донорной примеси на рис. 17б. При слабой

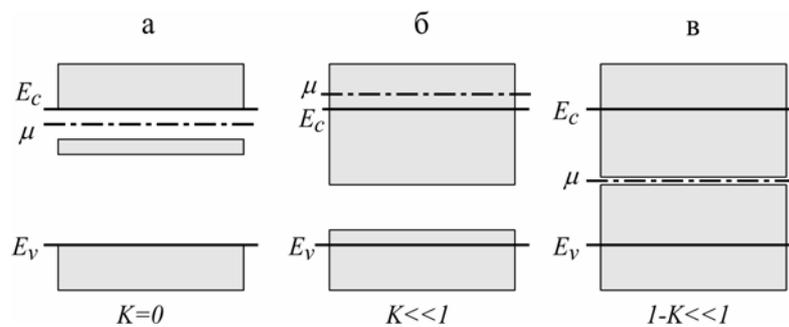


Рис. 17. Сравнение энергетических диаграмм слабо легированного (а) и сильно легированных (б, в) полупроводников n -типа; а, б – слабая компенсация, в – сильная компенсация. Заштрихованы области дозволённых энергий, E_c и E_v – края зон проводимости и валентной основного кристалла, μ – уровень Ферми, K – степень компенсации.

компенсации (степень компенсации $K \ll 1$) уровень Ферми лежит в области делокализованных состояний (рис. 17б). При сильной компенсации (когда $1 - K \ll 1$) существенно проявляются *флуктуационные уровни*, которые формируют далекие *хвосты* плотности состояний, а уровень Ферми лежит в области локализованных состояний в середине запрещенной зоны (рис. 17в). При этом плотность состояний сильно компенсированного полупроводника имеет те же основные особенности, что и плотность состояний аморфного полупроводника, изображенная на рис. 6.

В этой главе преимущественно рассматривается обусловленный примесями вклад в плотность состояний сильно легированного полупроводника n -типа при слабой компенсации ($K \ll 1$), когда концентрация доноров много больше, чем акцепторов. Этому случаю соответствуют энергетическая диаграмма, приведенная на рис. 17б. Состояния вблизи уровня Ферми заполнены электронами, имеющими концентрацию $n_0 \sim N_0$ и большую подвижность. Эти электроны образуют *вырожденный* электронный газ (Ферми-газ [7, § 56] с волновым числом Ферми $k_F \sim N_0^{1/3}$), который становится все более идеальным по мере увеличения концентрации примесей. Действительно, условие *идеальности* $T/V \gg 1$ для обусловленного

примесиями вырожденного электронного газа с характерными кинетической $\bar{T} = (\hbar k_F)^2 / (2m) \sim \hbar^2 N_0^{2/3} / m$ и потенциальной $\bar{V} \sim e^2 N_0^{1/3} / \kappa$ энергиями электрона принимает следующий вид:

$$\bar{T} / \bar{V} \sim N_0^{1/3} \hbar^2 \kappa / m e^2 = (N_0 a^3)^{1/3} \gg 1.$$

Очевидно, что последнее неравенство выполняется при условии сильного легирования $N_0 a^3 \gg 1$. Таким образом, электроны вблизи уровня Ферми сильно легированного слабо компенсированного полупроводника можно считать квазисвободными и характеризовать их импульсом.

§ 11. Линейное экранирование в сильно легированных полупроводниках

Плотность состояний *однородного* вырожденного электронного газа при нулевой температуре ($T \rightarrow 0$) выражается формулой [7, § 56]

$$g_0(E) dE = \frac{2 \cdot 4\pi p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E} dE, \quad (11.1)$$

где $E = E(p) = p^2 / (2m)$, p – импульс электрона, а множитель 2 учитывает вырождение электронов по спину. Здесь предполагается, что средний по объему заряд электронов компенсируется однородным положительным зарядом, соответствующим средней концентрации примеси N_0 . При этом однородная плотность электронного газа n_0 , равная N_0 , и его энергия Ферми $\mu_0 = (p_F^0)^2 / (2m)$ (граница энергии заполненных состояний) связаны соотношением (ср. с (4.1))

$$n_0 = \int_0^{\mu_0} g_0(E) dE = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \mu_0^{3/2} = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{p_F^0}{\hbar} \right)^3. \quad (11.2)$$

В сильно легированном некомпенсированном полупроводнике квазисвободные электроны экранируют положительный заряд случайно расположенных ионных остовов примеси и вследствие этого электронный газ становится *неоднородным*. Другими словами, наличие

случайного вклада в концентрацию (объемную плотность) $N(\mathbf{r})$ примесей вызывает пространственные флуктуации плотности подвижных электронов $n(\mathbf{r})$. При отсутствии компенсации средние концентрации ионов примеси и электронов однородны и равны друг другу, т. е. $N_0 = \langle N(\mathbf{r}) \rangle$, $n_0 = \langle n(\mathbf{r}) \rangle$ и $N_0 = n_0$, где угловыми скобками обозначается усреднение по конфигурациям примесных атомов. При этом флуктуации концентрации примеси описываются случайной функцией $\delta N(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) - N_0$. Случайное распределение неподвижного положительного заряда примесных центров обуславливает наличие флуктуационного потенциала $\varphi(\mathbf{r})$, который определяется уравнением Пуассона

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi e}{\kappa} [N(\mathbf{r}) - n(\mathbf{r})], \quad (11.3)$$

где κ – диэлектрическая проницаемость полупроводника.

Потенциал $\varphi(\mathbf{r})$ в сильно легированных полупроводниках можно считать плавным (масштаб его изменения l_{TF} , значительно больше,

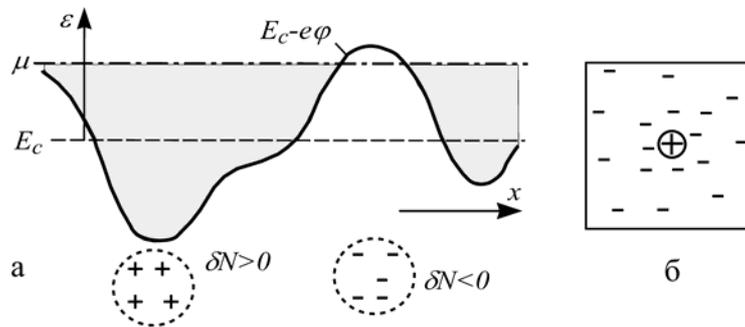


Рис. 18. а – Искривленное дно зоны проводимости $E_c - e\varphi(\mathbf{r})$ в сильно легированном полупроводнике. Заштрихованы уровни, заполненные электронами, μ – уровень Ферми. Показаны потенциальные яма и барьер для электронов, создаваемые соответственно флуктуациями сгущения ($\delta N > 0$) и разрежения ($\delta N < 0$) положительно заряженных ионов примеси. б – Экранирование положительного заряда электронами.

чем дебройлевская длина волны электрона $\sim \hbar/\sqrt{m\mu}$ на уровне Ферми, см. далее оценку (12.10)). К образцу с плавным изменением потенциальной энергии электрона $-e\varphi(\mathbf{r})$ применимо представление об искривленных энергетических зонах. Так, хорошо известен эффект искривления зон вблизи поверхности полупроводника [4]. В сильно легированном полупроводнике искривление зон имеет флуктуационную природу и потому носит случайный характер [1, 4, 14]. При этом краю зоны проводимости локально соответствует энергия $E_c - e\varphi(\mathbf{r})$, а краю валентной зоны – энергия $E_v - e\varphi(\mathbf{r})$. На рис. 18 изображено, как для некоторой реализации потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ меняются энергия дна зоны проводимости и заполнение электронных состояний (заштрихованы) в зависимости от пространственных координат. В термодинамическом равновесии уровень Ферми μ постоянен по образцу, а концентрация электронов меняется: она повышена в областях сгущения ($\delta N > 0$) и понижена в областях разрежения ($\delta N < 0$) положительно заряженных примесей. Таким образом, подвижные электроны переходят из областей с недостатком положительного заряда в области с избытком такого заряда, и тем самым они ослабляют действие неподвижных зарядов примеси. В этом и заключается эффект *экранирования* квазисвободными электронами заряда примесей, иллюстрацией которого служит рис. 18б.

При наличии плавного изотропного потенциала $\varphi(\mathbf{r})$, такого что $|\varphi/\nabla\varphi| \gg \hbar/\sqrt{m\mu}$, выражение (11.2) можно обобщить на случай неоднородной плотности электронного газа. Именно

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \left[\frac{p_F(\mathbf{r})}{\hbar} \right]^3 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} [\mu + e\varphi(\mathbf{r})]^{3/2} \quad (11.4)$$

в областях, классически допустимых для электрона, где $\mu > -e\varphi(\mathbf{r})$, и $n(\mathbf{r}) = 0$ в классически недоступных областях, где $\mu < -e\varphi(\mathbf{r})$. Уравнение (11.4) соответствует *квазиклассическому* приближению, так как оно приписывает электрону, находящемуся на уровне Ферми, импульс $p_F(\mathbf{r})$, который считается медленной функцией координат.

При заданной концентрации примесей $N(\mathbf{r})$ подстановка (11.4) в

(11.3) в общем случае приводит к самосогласованному нелинейному уравнению относительно $\varphi(\mathbf{r})$. Однако при условии $|e\varphi|/\mu \ll 1$, которое выполняется в сильно легированных полупроводниках, выражение (11.4) принимает вид:

$$n(\mathbf{r}) = n_0 + \delta n \approx n_0 + 3n_0 e\varphi(\mathbf{r})/(2\mu).$$

Подстановка этого выражения в (11.3) дает следующее линеаризованное уравнение для случайного потенциала:

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) - \frac{1}{l_{TF}^2}\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{4\pi e}{\kappa}\delta N(\mathbf{r}), \quad (11.5)$$

где

$$l_{TF}^2 = \frac{\mu\kappa}{6\pi e^2 n_0} = \frac{1}{k_{TF}^2}. \quad (11.6)$$

Величины l_{TF} и k_{TF} носят названия соответственно *длины экранирования* и волнового числа Томаса – Ферми (это – аналоги параметров Дебая, относящихся к классическим плазмоподобным средам). Заметим также, что задача экранирования, сформулированная выше для квантового электронного газа, аналогична статистической задаче Томаса – Ферми теории многоэлектронных атомов [8, § 70].

Решение линейного неоднородного уравнения (11.5) можно выразить в форме

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int d^3r' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \delta N(\mathbf{r}'), \quad (11.7)$$

с помощью *неслучайного* ядра G (функции Грина), удовлетворяющего уравнению

$$\Delta G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \frac{1}{l_{TF}^2} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{4\pi e}{\kappa} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (11.8)$$

Задача. Используя метод преобразований Фурье, показать, что решение уравнения (11.8) удовлетворяет условию $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ и имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e}{\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/l_{TF}). \quad (11.9)$$

Выражение (11.9) описывает *экранированный* кулоновский потенциал положительного точечного заряда. Он переходит в *обычный*

кулоновский потенциал вблизи заряда (при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll l_{TF}$) и ослабляет (экранирует) действие заряда на расстояниях, превышающих характерную длину l_{TF} . В силу линейности уравнения (11.5) заряды экранируются независимо друг от друга: например, в случае $\delta N(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ выражение (11.7) дает *суперпозицию* $\varphi(\mathbf{r}) = \sum_i G(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$ потенциалов (11.9) отдельных зарядов. Линейность экранирования связана с условием линеаризации $|e\varphi|/\mu \ll 1$, которое для случайного потенциала в электронейтральной среде со средним значением $\langle \varphi \rangle = 0$ принимает вид: $e\sqrt{\langle \varphi^2 \rangle} \ll \mu$. Как мы увидим далее, это условие выполняется в слабо компенсированных полупроводниках, но может нарушаться при сильной компенсации [1].

§ 12. Плотность состояний вблизи края зоны проводимости

Рассмотрим теперь, каким образом пространственные флуктуации концентрации примесей $\delta N(\mathbf{r})$ приводят к появлению флуктуационного вклада в плотность электронных состояний вблизи края зоны проводимости. Обобщим выражение (11.1), заменив в нем энергию свободного электрона E на кинетическую энергию электрона $\varepsilon + e\varphi(\mathbf{r})$ в неоднородном потенциальном поле $\varphi(\mathbf{r})$, где ε – полная энергия электрона, отсчитанная вверх от E_c . Это дает следующую *локальную* (зависящую от \mathbf{r}) плотность состояний в вырожденном электронном газе:

$$g(\varepsilon, \mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon + e\varphi(\mathbf{r})}, \quad (12.1)$$

где энергия ε отсчитывается вверх от порога подвижности E_c . Плотность состояний всей системы получается в результате усреднения (11.1) по объему образца Ω . Это выражается интегралом

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{\varepsilon > V(\mathbf{r}) = -e\varphi(\mathbf{r})} \frac{d^3r}{\Omega} \sqrt{\varepsilon + e\varphi(\mathbf{r})}, \quad (12.2)$$

который берется по объему, классически допустимому для движения

электронов с энергией ε , что обозначается условием $\varepsilon > V(\mathbf{r})$. Как отмечалось в § 1, вследствие однородности системы в среднем усреднение по объему по формуле (12.2) удобно заменить эквивалентным усреднением по распределению потенциальной энергии электрона $V = -e\varphi$ в некоторой точке пространства. Этому соответствует замена (12.2) на

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\varepsilon} dV \cdot F(V) \cdot \sqrt{\varepsilon - V}, \quad (12.3)$$

где $F(V)$ – функция распределения по V .

Чтобы выполнить усреднение, примем распределение примесей, для которого

$$\langle N(\mathbf{r}) - N_0 \rangle = \langle \delta N(\mathbf{r}) \rangle = 0, \quad (12.4')$$

$$\langle \delta N(\mathbf{r}) \delta N(\mathbf{r}') \rangle = N_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (12.4'')$$

Здесь скобками $\langle \dots \rangle$ обозначено усреднение по ансамблю конфигураций примеси $N(\mathbf{r})$. Усредняя выражение (11.7) с учетом условия (12.4'), находим, что среднее значение потенциальной энергии равно нулю: $\langle V(\mathbf{r}) \rangle = -e\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = 0$. В выражении (12.4'') пренебрежено корреляциями пространственных флуктуаций (ср. с [7, § 118]). Вычислив $e^2 \langle \varphi^2(\mathbf{r}) \rangle$ из (11.7) и (11.9) с учетом коррелятора (12.4''), для дисперсии потенциальной энергии электрона получаем

$$\begin{aligned} \gamma^2 &\equiv 2e^2 \langle \varphi^2(\mathbf{r}) \rangle = 2e^2 N_0 \int d^3 r' G^2(\mathbf{r}') = \\ &= 4\pi N_0 \left(\frac{e^2}{\kappa} \right)^2 l_{TF} = 4\pi \left(N_0 l_{TF}^3 \right) \left(\frac{e^2}{\kappa l_{TF}} \right)^2. \end{aligned} \quad (12.5)$$

Отсюда следует, что среднеквадратичная флуктуация потенциальной энергии $\gamma \sim \left(e^2 / \kappa l_{TF} \right) \sqrt{N_0 l_{TF}^3}$ пропорциональна флуктуации числа частиц $\sim \left(N_0 l_{TF}^3 \right)^{1/2}$ в объеме экранирования. Ввиду того что эта флуктуация числа частиц мала по сравнению со средним числом

частиц $\sim N_0 l_{TF}^3$ в том же объеме $\sim l_{TF}^3$, можно считать флуктуации *гауссовыми*. Это позволяет принять в (12.3) нормальный закон распределения

$$F(V) = \left(1/\sqrt{\pi} \gamma\right) \cdot \exp\left(-V^2/\gamma^2\right) \quad (12.6)$$

с γ из (12.5). После подстановки (12.6) плотность состояний (12.3) выражается формулой

$$g(\varepsilon) = \frac{\sqrt{\gamma}}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} J(x), \quad (12.7)$$

где

$$J(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^x dy \sqrt{x-y} \exp(-y^2),$$

$x = \varepsilon/\gamma$ и $y = V/\gamma$.

Асимптотические выражения для функции (12.7) имеют вид:

$$g(\varepsilon) = \begin{cases} g_0(|\varepsilon|) \left[1 - 1/(4x^2)\right] & \text{при } \varepsilon > 0, \\ g_0(|\varepsilon|) \frac{1}{2^{5/2} x^2} \exp(-\varepsilon^2/\gamma^2) & \text{при } \varepsilon < 0, \quad |x| = |\varepsilon|/\gamma, \end{cases} \quad (12.8)$$

а $g_0(\varepsilon)$ – функция из (11.1). Плотность состояний $g(\varepsilon)$, вычисленная по формуле (12.8), показана на рис. 19 в сравнении с зависимостью $g_0(x) \sim \sqrt{x}$, которая соответствует выражению (11.1) для однородного вырожденного электронного газа. Как видно из рис. 19 и первой из формул (12.8), в разрешенной зоне ($\varepsilon > 0$) плотность состояний электронного газа при $\varepsilon/\gamma \gg 1$ приближается асимптотически к $g_0(\varepsilon)$. Принципиальным следствием гауссовых флуктуаций концентрации примесей является появление хвоста плотности состояний вида

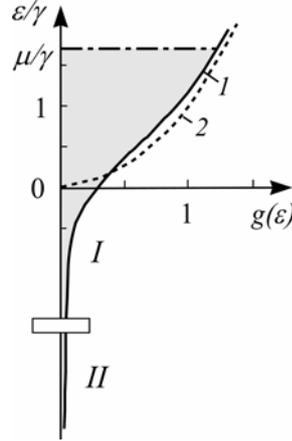


Рис. 19. 1 – Плотность состояний вблизи дна зоны проводимости в приближении Томаса – Ферми для гауссова случайного потенциала. 2 – Функция $g_0(\varepsilon)$.

$g(\varepsilon) \sim \exp(-\varepsilon^2/\gamma^2)$ в глубине запрещенной зоны (область I при $\varepsilon < 0$). Этот хвост образован флуктуационными уровнями, принадлежащими состояниям, которые локализованы на флуктуационных ямах экранирующего потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ и исчезают вместе с ним при $\gamma \rightarrow 0$. Из выражений (11.2), (12.5) оценим кинетическую μ и потенциальную γ энергии электрона, а из (11.6) – величину l_{TF} . Учитывая, что $a = \hbar^2 \kappa / (me^2)$ и $N_0 = n_0$ (компенсация отсутствует), убеждаемся, что предполагавшиеся выше условия идеальности

$$\mu/\gamma \sim (\hbar^2 n_0^{2/3} / m) \cdot (\kappa / n_0^{1/2} l_{TF}^{1/2} e^2) = (N_0 a^3)^{1/4} \gg 1 \quad (12.9)$$

и квазиклассичности (плавности флуктуационного потенциала $\varphi(\mathbf{r})$)

$$l_{TF} / (\hbar / \sqrt{m\mu}) \sim l_{TF} \cdot k_F \sim (N_0 a^3)^{1/6} \gg 1 \quad (12.10)$$

действительно выполняются для вырожденного электронного газа сильно легированных полупроводников с $N_0 a^3 \gg 1$. Условие (12.9) показывает также, что уровень Ферми μ на рис. 19 лежит высоко ($\mu/\gamma > 1$) в области, заполненной делокализованными состояниями.

§ 13. Метод оптимальной флуктуации и глубокие хвосты плотности состояний

В предыдущем параграфе были рассмотрены *крупномасштабные* (гауссовы) флуктуации потенциала. Действительно, характерная длина l_{TF} изменения экранирующего потенциала φ велика по сравнению с расстоянием между примесями $N_0^{-1/3}$: $l_{TF} \gg N_0^{-1/3}$, т. к. с учетом

$$(11.6) \quad \text{имеем} \quad l_{TF} N_0^{1/3} \sim (N_0 a^3)^{1/6} \gg 1 \quad \text{при} \quad N_0 a^3 \gg 1.$$

Крупномасштабные флуктуации определяют плотность состояний в глубине запрещенной зоны на характерном расстоянии по энергии $\sim \gamma$ от края зоны проводимости E_c . Характерный пространственный размер области *мелкомасштабных* флуктуаций существенно меньше,

чем $N_0^{-1/3}$, а вероятность таких флуктуаций экспоненциально мала. Экспоненциально малым оказывается и связанный с такими флуктуациями вклад в плотность состояний $g(\varepsilon)$, который проявляется в области энергий $\varepsilon < 0$, $|\varepsilon| \gg \gamma$. Столь значительные сдвиги уровней естественно связывать с потенциальными ямами малой ширины по сравнению с $N_0^{-1/3}$, но весьма глубокими из-за того, что каждая такая яма создается большим локально избыточным зарядом примеси по сравнению со средним зарядом. Эти соображения лежат в основе метода оптимальной флуктуации, описывающего те флуктуационные уровни, что лежат глубоко в запрещенной зоне [1, 4, 11].

Пусть некоторая реализация потенциальной энергии электрона $V(\mathbf{r})$ создает уровень с заданным значением энергии ε в глубине запрещенной зоны. Вероятность образования уровня ε определяется некоторым функционалом $W_\varepsilon[V(\mathbf{r})]$, зависящим от $V(\mathbf{r})$. Энергию ε далее отсчитываем от E_c в глубь запрещенной зоны, так что теперь $\varepsilon > 0$ соответствует локализованным (связанным) состояниям, а $V(\mathbf{r}) > 0$ – потенциальной яме. Плотность электронных состояний в области хвоста, проникающего глубоко в запрещенную зону, выражается суммой вкладов (вероятностей), обусловленных всеми реализациями потенциала $V(\mathbf{r})$ из ансамбля $\{V(\mathbf{r})\}$:

$$g(\varepsilon) \sim \sum_{\{V\}} W_\varepsilon[V]. \quad (13.1)$$

Это выражение соответствует усреднению по всем реализациям потенциала, который будем считать однородным в среднем.

Вероятность флуктуаций, ответственных за возникновение уровней с достаточно большой энергией связи ε , экспоненциально мала [11]. Поэтому на самом деле основной вклад в сумму (13.1) при данном значении ε дает некоторая наиболее вероятная реализация потенциала $V_{\max}(\mathbf{r})$ из ансамбля $\{V(\mathbf{r})\}$. Другими словами, существует такой потенциал $V_{\max}(\mathbf{r})$, который доставляет максимум величинам $W_\varepsilon[V(\mathbf{r})]$, т. е. $\max_{\{V\}} W_\varepsilon[V(\mathbf{r})] \cong W_\varepsilon[V_{\max}(\mathbf{r})]$ в (13.1). В силу

указанной экспоненциальной малости величин $W_\varepsilon[V(\mathbf{r})]$ в зависимости (13.1) от ε достаточно учитывать только те флуктуационные ямы, для которых уровень с энергией ε является наименьшим (основным). Таким образом, интерес представляет главный член в показателе экспоненты, определяющей величину (13.1). Он выражается формулой

$$\ln[g(\varepsilon)/g(0)] \approx \ln W_\varepsilon[V_{\max}], \quad (13.2)$$

где $g(0)$ – постоянная.

Задачей *метода оптимальной флуктуации* является определение характеристик наиболее вероятной реализации потенциала $V_{\max}(\mathbf{r})$, создающей локализованное состояние электрона с энергией связи ε . В случае легированного полупроводника удобно связывать потенциал с конкретной конфигурацией примесных атомов, которая формирует этот потенциал. Рассмотрим вначале алгоритм такого анализа для сильно легированного полупроводника [1, 4]. Пусть средняя по объему образца концентрация примеси равна N_0 , при этом среднее число атомов примеси в любой шаровой области радиуса R равно $\bar{k} = N_0 R^3$ (численные множители в дальнейших оценках опускаются). Представим себе пространственную флуктуацию концентрации примеси как шаровую область радиуса R с избыточным числом Z примесных атомов, положительный заряд которых Ze однородно "размазан" внутри рассматриваемого шарового объема. Полное число атомов примеси в таком шаре равно

$$k = Z + \bar{k} = Z + N_0 R^3. \quad (13.3)$$

Энергии ε флуктуационного электронного уровня в запрещенной зоне полупроводника может соответствовать скопление притягивающих примесей или разрежение отталкивающих. Мы будем рассматривать первый случай, когда $Z > 0$ обозначает избыточное число примесей во флуктуации. Для вероятности попадания k примесных атомов в объем $\sim R^3$, где в среднем должно находиться $\bar{k} = N_0 R^3$ примесей, предполагаем распределение Пуассона [7, § 116], т. е. $W_k = \bar{k}^k \exp(-\bar{k})/k!$.

Отсюда при $k \gg 1$, $\bar{k} \gg 1$ с учетом формулы Стирлинга $\ln k! \approx k \ln k - k$ получаем $\ln W_k = k \ln(\bar{k}/k) + (k - \bar{k})$. Подставив в это

выражение k из (13.3) и $\bar{k} = N_0 R^3$, получаем следующее выражение для вероятности флуктуации:

$$\ln W(R, Z) = (Z + N_0 R^3) \ln \left[N_0 R^3 / (Z + N_0 R^3) \right] + Z. \quad (13.4)$$

Задача. Показать, что потенциальная энергия $-V(R, Z)$ электрона в поле однородно заряженного шара радиуса R с полным положительным зарядом Ze равна

$$\begin{aligned} & -\left(Ze^2 / \kappa R \right) \cdot \left[3/2 - r^2 / (2R^2) \right] \quad \text{при} \quad r < R, \\ & -Ze^2 / \kappa r \quad \text{при} \quad r > R, \end{aligned} \quad (13.5)$$

и может быть аппроксимирована прямоугольной потенциальной ямой.

Теперь предположим, что из уравнения Шредингера

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}; R, Z) \right] \Psi(\mathbf{r}) = \tilde{\varepsilon}(R, Z) \Psi(\mathbf{r}) \quad (13.6)$$

нам удалось найти собственное значение энергии $\tilde{\varepsilon}(R, Z)$ для основного состояния электрона в поле однородно заряженного шара, где $\tilde{\varepsilon}(R, Z)$ зависит от R и Z как от параметров. Поскольку в (13.6) энергия $\tilde{\varepsilon}(R, Z)$ отсчитывается в глубину запрещенной зоны, то в качестве $V(\mathbf{r}; R, Z)$ используется взятое с обратным знаком выражение (13.5) или его аппроксимация. Зададим энергию ε флуктуационного уровня и из условия $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}(R, Z)$ выразим число избыточных примесных атомов $Z = Z(\varepsilon, R)$ в шаре, моделирующем флуктуацию, через его радиус R и ε . После подстановки $Z(\varepsilon, R)$ вместо Z в выражение (13.4) для вероятности того, что шаровая флуктуация радиуса R создает уровень с энергией ε , находим выражение

$$W_\varepsilon(R, Z) = W(R, Z(\varepsilon, R)) = W_1(R, \varepsilon). \quad (13.7)$$

Оптимизируем эту вероятность, найдя значение R_{\max} из условия :

$$\partial W(R, Z(\varepsilon, R)) / \partial R \Big|_{R=R_{\max}} = 0. \quad (13.8)$$

Тогда соотношение (13.2) для оптимальной флуктуации, которая соответствует максимуму вероятности $W(R, Z(\varepsilon, R))$ в выражении (13.7), принимает вид:

$$\ln [g(\varepsilon)/g(0)] \approx \ln W[R_{\max}, Z(\varepsilon, R_{\max})] . \quad (13.9)$$

Потенциальная энергия электрона в поле однородно заряженного шара (13.5) приблизительно соответствует действию потенциальной ямы глубиной $Ze^2/\kappa R$ и шириной R . На самом деле на электрон кроме поля рассматриваемой шаровой флуктуации действует потенциал экранирования избыточных примесей электронным газом. Поэтому в общем случае для энергии электрона внутри ямы справедливы оценки

$$V(R, Z) = \begin{cases} (Ze^2/\kappa R) & \text{при } l_{TF} \gg R, \\ (Ze^2/\kappa l_{TF})(l_{TF}/R)^3 & \text{при } l_{TF} \ll R. \end{cases} \quad (13.10)$$

Здесь первое условие учитывает, что заряд примесей внутри очень узкой флуктуационной ямы практически не экранируется. Второе условие показывает, что вследствие экранирования действие любого избыточного заряда не проявляется на расстояниях от него, больших чем l_{TF} . При этом существенно действие только той части $(l_{TF}/R)^3$ заряда шара Ze , которая находится внутри объема экранирования l_{TF}^3 .

В случае достаточно широкой ямы, когда $R \gg \hbar/\sqrt{mV}$ (глубокий уровень), для низшего уровня в формулах (13.10) можно, не решая уравнения (13.6), приближенно заменить $\tilde{\varepsilon}$ на V (и $\varepsilon \approx V$), так как выполняется условие $|\tilde{\varepsilon} - V| \ll V$ нахождения этого уровня практически у дна ямы. При этом оптимизированная величина $W_1(R, \varepsilon)$ из (13.7) выражает вероятность того, что флуктуация концентрации примесей радиуса R создает яму, максимальная глубина которой равна V .

Результаты качественного анализа функции $\ln W_1(R, \varepsilon)$ [1] показаны на рис. 20. Два максимума зависимости $\ln W_1(R, \varepsilon)$ (при $R \approx R_1$ и $R \approx l_{TF}$) соответствуют двум типам наиболее вероятных

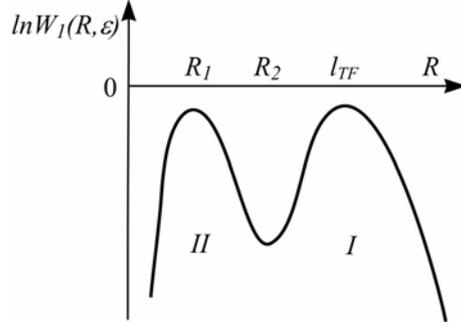


Рис. 20. Качественное изображение логарифма вероятности образования уровня энергии в глубине запрещенной зоны на расстоянии ε от края зоны проводимости. Этот уровень обусловлен флуктуацией положительного заряда Ze , однородно распределенного в шаре радиуса R .

флуктуаций. Сначала обсудим флуктуации, соответствующие $R \approx l_{TF}$.

При $x = Z/(N_0 R^3) \ll 1$ из выражения (13.4) следует, что

$$\ln W(R, Z) = N_0 R^3 [-(1+x) \ln(1+x) + x] \cong -R^3 N_0 x^2 = -Z^2 / (N_0 R^3). \quad (13.11)$$

Подставим сюда значение $Z = Z(V, R)$, найденное из условия $\varepsilon = V(R, Z)$ с функцией $V(R, Z)$ из (13.10). Тогда для величины (13.11) по разные стороны от точки $R = l_{TF}$ находим

$$\ln W_2(R, V) = \begin{cases} -V^2 (\kappa R / e^2)^2 / (N_0 R^3) \sim -1/R & \text{при } R < l_{TF}, \\ -V^2 (\kappa R^3 / (e l_{TF})^2)^2 / (N_0 R^3) \sim -R^3 & \text{при } R > l_{TF}. \end{cases} \quad (13.12)$$

Эти выражения равны друг другу при $R = l_{TF}$, где они обеспечивают максимум функции (13.12), равный

$$\ln W_2(l_{TF}, V) = -V^2 (\kappa / e^2)^2 / (N_0 l_{TF}) = -V^2 / \gamma^2, \quad (13.13)$$

причем γ выражается формулой (12.5). Наконец, подстановка

оптимального (максимального) значения (13.13) в (13.2) с учетом условия $\varepsilon \approx V$ для широкой ямы дает

$$g(\varepsilon)/g(0) = \exp(-\varepsilon^2/\gamma^2). \quad (13.14)$$

Эта формула совпадает со вторым из выражений (12.8) и имеет тот же физический смысл: фактически в рамках метода оптимальной флуктуации мы показали, что вероятность появления гауссовой флуктуации в форме шарового скопления примесей максимальна при $R = l_{TF}$. По предположению $x \ll 1$ случаю гауссовых флуктуаций соответствует $Z \ll \bar{k} = N_0 R^3$, т. е. избыточное число примесей в шаровой флуктуации действительно мало по сравнению со средним по объему образца.

Вблизи второго максимума (при $R \approx R_1$ на рис. 20), где $Z \gg N_0 R^3 = \bar{k}$, или $y = N_0 R^3/Z \ll 1$, флуктуации не являются гауссовыми (точка $R \approx R_2$ на рис. 20 соответствует условию $Z \sim N_0 R^3$). При этом из (13.4) следует

$$\ln W(R, Z) = Z \left\{ (1+y) [\ln y - \ln(1+y)] + 1 \right\} \cong -Z \ln \left[Z / (N_0 R^3) \right]. \quad (13.15)$$

Условие $Z \gg N_0 R^3$ означает, что избыточное число положительно заряженных атомов примеси во флуктуации значительно превышает среднее число частиц в шаре. Такую флуктуацию можно представить себе как большой избыточный заряд Ze , сконцентрированный в малом объеме $\sim R^3$ и действующий на электрон подобно атомному ядру конечного радиуса R . Энергия связи электрона с таким "ядром" при $R \ll \hbar/\sqrt{m\varepsilon} \sim a\sqrt{E_0/\varepsilon}$ зависит от Z следующим образом [9, задача 11.2]:

$$\tilde{\varepsilon}(R, Z) = E_0 Z^2 \cdot \left[1 - (ZR/a)^2 \right]. \quad (13.16)$$

Здесь $E_0 = me^4/(\hbar\kappa)^2$ – энергия связи электрона на изолированном точечном примесном центре с боровским радиусом $a = \hbar/\sqrt{2mE_0}$ и зарядом e . Второй член в скобках (13.16) дает поправку на неточность кулоновского "ядра" радиуса $R \ll a$.

Подстановка в (13.15) главного члена разложения

$$Z = Z(\varepsilon, R) = \sqrt{\varepsilon/E_0} \left[1 + (\varepsilon/E_0)(R/a)^2 \right], \quad (13.17)$$

которое найдено из (13.16) при условии $\varepsilon = \tilde{\varepsilon}(R, Z)$, дает для плотности состояний зависимость [1]

$$g(\varepsilon) = g(0) \exp \left(-\sqrt{\frac{\varepsilon}{E_0}} \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{D(\varepsilon)}{N_0 a^3} \right] \right), \quad (13.18)$$

где

$$D(\varepsilon) \approx \left\{ \ln \left[\left(\frac{\varepsilon}{E_0} \right)^2 \frac{1}{N_0 a^3} \right] \right\}^{3/2}$$

Таким образом, в сильно легированных полупроводниках глубокие хвосты электронной плотности имеют два участка (*I* и *II* на рис. 19 и 20). На расстоянии $\varepsilon \sim \gamma$ ниже E_c в глубине запрещенной зоны согласно (12.8) или (13.14) имеется вклад в плотность состояний вида $g(\varepsilon) \sim \exp(-\varepsilon^2/\gamma^2)$, обусловленный гауссовыми флуктуациями концентрации примесей (область *I*). Обусловленная маловероятными флуктуациями часть хвоста плотности состояний в области *II* на рис. 19 и 20 соответствует формуле $g(\varepsilon) \sim \exp(-\sqrt{\varepsilon/E_0})$ из (13.18). Вклад (13.18) связан с глубокими ямами малой ширины и проявляется при значительно больших энергиях, чем γ : $\varepsilon > \gamma(\gamma/E_0)^{1/3} \gg \gamma$. Границей между областями (13.14) и (13.18) служит энергия $E_1 = \gamma(\gamma/E_0)^{1/3} \left\{ \ln \left[(\gamma/E_0)^{8/3} / (N_0 a^3) \right] \right\}^{2/3}$.

Задача. Пользуясь стандартными параметрами полупроводников, оценить численно величину γ флуктуации потенциальной энергии электрона (формула (12.5)) и сравнить ее с шириной запрещенной зоны полупроводника E_g и энергией связи электрона на изолированной примеси E_0 .

Литература

Основная

1. Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. Наука, М., 1979.
2. А.Л. Эфрос. Физика и геометрия беспорядка. Наука, М., 1982.
3. R. Zallen. The Physics of Amorphous Solids, Wiley, N.Y., 1983.
4. В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. Физика полупроводников. Наука, М., 1977.
5. В.Л. Бонч-Бруевич, И.П. Звягин, Р. Кайпер, А.Г. Миронов, Р. Эндерлайн, Б. Эссер. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. Наука, М., 1981.
6. В.А. Кособукин. Введение в теорию неупорядоченных систем. Локализованные состояния. Учеб. пособие. Изд-во СПбГТУ, СПб, 2000.
7. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Том V. Наука, М., 1964.
8. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Том III. Наука, М., 1982.
9. В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. Задачи по квантовой механике. Наука, М., 1981.

Дополнительная

10. Дж. Займан. Модели беспорядка. Теоретическая физика одномерно неупорядоченных систем. Мир, М., 1982.
11. И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. Введение в теорию неупорядоченных систем. Наука, М., 1982.
12. Н.Ф. Мотт. Переходы металл – изолятор. Наука, М., 1979.
13. Н. Мотт, Э. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах. Мир, М., 1974; 2-е изд.: 1982.
14. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. Электронные свойства двумерных систем. Мир, М., 1985.
15. Электронные явления в халькогенидных стеклообразных полупроводниках. Под ред. К.Д. Цэндина. Наука, СПб, 1996.
16. А.А. Абрикосов. Основы теории металлов. Наука, М., 1987.
17. С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II, Случайные поля. Наука, М., 1978.

Оглавление

Предисловие	3
Глава 1. Общие свойства неупорядоченных систем	
§ 1. Основные особенности сильно неупорядоченных систем.....	3
§ 2. Формула Кубо – Гринвуда для проводимости.....	9
§ 3. Переход Андерсона (андерсоновская локализация).....	14
§ 4. Некоторые понятия, связанные с переходом Андерсона А. Концепция порога подвижности.....	22
Б. Концепция минимальной металлической проводимости.....	24
§ 5. Переход Мотта.....	27
Глава 2. Теория перколяции	31
§ 6. Решеточные задачи теории перколяции.....	32
§ 7. Перколяционные кластеры.....	38
§ 8. Задачи на случайных узлах.....	43
§ 9. Континуальные модели.....	44
Глава 3. Плотность примесных состояний в сильно легированных полупроводниках	
§ 10. Особенности энергетической структуры легированных полупроводников.....	49
§ 11. Линейное экранирование в сильно легированных полупроводниках.....	51
§ 12. Плотность состояний вблизи края зоны проводимости.....	55
§ 13. Метод оптимальной флуктуации и глубокие хвосты плотности состояний.....	58
Литература	66

КОСОБУКИН Владимир Артемович

**ТЕОРИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ.
ТВЕРДЫЕ ТЕЛА С СИЛЬНЫМ БЕСПОРЯДКОМ**

Учебное пособие

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97.

Подписано в печать 29.05.2000. Формат 60×84/16. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 4,25. Уч.-изд. л. 4,25. Тираж 100. Заказ 351.

Отпечатано с готового оригинал-макета,
предоставленного автором,
в типографии Издательства СПбГТУ.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29