

537.31.33

**ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ
СИСТЕМАХ**

(Переход Андерсона)

A. L. Эфрос

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	41
2. Узкие зоны и переход Мотта	42
3. Модель Андерсона	45
4. Локализация в модели Лишица	50
5. Примеры переходов Андерсона	53
6. Электропроводность и волновые функции электронов в окрестности перехода Андерсона	56
7. Некоторые аспекты теории перехода Андерсона. Разговор с теоретиком о теории	60
8. Заключение	64
Цитированная литература	64

1. ВВЕДЕНИЕ

Направление, о котором пойдет речь в этом обзоре, возникло из работы Андерсона¹, которая называется «Отсутствие диффузии в некоторых случайных решетках». Эта работа появилась в 1958 г. и несколько опередила свое время. Резко возросший в середине шестидесятых годов интерес к аморфным полупроводникам поставил вопрос об электронных состояниях неупорядоченных систем на передний план физики конденсированных сред. В этот период идеи, высказанные Андерсоном, были оценены в полной мере.

Для определенности мы будем спачала говорить о кристалле, в который вводится примесь, создающая электронное состояние с энергией E_0 , находящейся в запрещенной зоне. Приято говорить, что при конечной концентрации примесей одного сорта вместо примесного уровня возникает примесная зона, имеющая конечную энергетическую ширину. При слове «зона» в воображении читателя возникает модель Кронига — Пенни, прекрасно иллюстрирующая размытие уровня в зону. В этом случае состояния характеризуются волновым вектором и их свойства мало отличаются от свойств плоских волн. Однако в случае хаотического расположения примесей в системе отсутствует трансляционная симметрия, предполагаемая в модели Кронига — Пенни. Андерсон показал, что благодаря этому в ряде случаев примесная зона не обладает самым важным свойством кристаллических зон — электрон, помещенный в один из примесных центров, не расплывается по всем центрам, из которых составлена зона. Его волновая функция остается локализованной. При малых концентрациях примесей все состояния оказываются локализованными. При уве-

личении концентрации в примесной зоне появляется полоса энергий, внутри которой состояния делокализованы. Переход от делокализованных состояний к локализованным, происходящий при изменении энергии, концентрации примесей или других параметров получил название перехода Андерсона.

Нам представляется, что теория перехода Андерсона не является в настоящее время законченной, и мы не ставим своей целью дать обзор методов, разработанных в связи с этим вопросом. Мы предупреждаем, что список цитированной нами литературы не является полным. Цель обзора состоит в попытке изложить основные идеи, высказанные в связи с переходом Андерсона, максимально простым образом, не используя практически никакого математического аппарата. Нам кажется, что такое изложение может быть полезным для физиков-экспериментаторов, занимающихся этим вопросом, а также для теоретиков, желающих составить о нем представление.

План обзора состоит в следующем. В гл. 2 мы воспользуемся методом сильной связи и обсудим свойства узких зон, образованных периодически расположеннымми примесными центрами, находящимися на больших расстояниях друг от друга. Зонная структура, возникающая при таком стандартном рассмотрении, неустойчива. Электрон-электронное взаимодействие приводит к расщеплению зоны, в результате чего заполненная и пустая зоны оказываются разделенными щелью (переход Мотта). Эта глава носит вводный характер. В дальнейшем мы ограничиваемся однозадачным приближением и обсуждаем вопрос о локализации электронов в моделях Андерсона и Лифшица. В гл. 3 формулируется модель Андерсона, объясняются причины, приводящие к локализации электронов и дается простая оценка критерия локализации. В гл. 4 показывается, что и в модели Лифшица (хаотически расположенные короткодействующие центры) электронные состояния являются локализованными. В гл. 5 обсуждаются некоторые системы, в которых наблюдается переход Андерсона. В гл. 6 рассматриваются свойства электронных состояний в окрестности перехода Андерсона. Наконец, в гл. 7 обсуждаются теоретические трудности, возникающие при описании перехода Андерсона.

2. УЗКИЕ ЗОНЫ И ПЕРЕХОД МОТТА

Этот раздел мы начнем с вспомогательной задачи, от которой будем в дальнейшем отталкиваться. Допустим, что примеси в кристалле не распределены хаотически, а образуют правильную кристаллическую решетку (подрешетку примесей), имеющую период гораздо больший, чем основная решетка кристалла. С помощью метода сильной связи получим энергетический спектр и волновые функции электронов в примесной зоне. Эта модель позволяет выработать терминологию, используемую в следующих разделах. Кроме того, мы кратко обсудим здесь вопрос о роли электрон-электронного взаимодействия в условиях узкой разрешенной зоны.

Потенциал, создаваемый примесной подрешеткой, имеет вид

$$\tilde{V}(\mathbf{r}) = \sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.1)$$

где суммирование ведется по всем узлам примесной подрешетки, $U(\mathbf{r})$ — потенциал одного примесного центра. Задача будет решаться в рамках метода эффективной массы. Допустим, что нам известны волновые функции φ_n и энергетические уровни E_n , соответствующие решению уравнения Шредингера с потенциалом одного примесного центра

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \varphi_n = E_n \varphi_n, \quad (2.2)$$

где m — эффективная масса. Для простоты ограничимся случаем грандартной зоны, т. е. невырожденной зоны с изотропным и квадратичным спектром.

В дальнейшем будем считать, что ширина примесной зоны гораздо меньше расстояний между уровнями E_n , и рассматривать окрестность одного из этих уровней E_0 . Известно, что волновую функцию, соответствующую потенциалу (2.1), следует конструировать в виде суперпозиции функций $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$, удовлетворяющих (2.2).

$$\Psi = \sum_j a_j \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (2.3)$$

$$\sum_j |a_j|^2 = 1. \quad (2.4)$$

Это приближение должно быть хорошим, если радиус локализации a функции $\varphi(\mathbf{r})$ мал по сравнению с периодом подрешетки примесей b_0 . Действительно, основной вклад в энергию дают те области пространства, в которых волновая функция $\Psi(\mathbf{r})$ велика, а эти точки, как видно из (2.3), находятся очень близко от примесных центров, т. е. в сфере действия одной примеси, где справедливо уравнение (2.2). Таким образом, выражение (2.3) должно быть близко к решению уравнения Шредингера с потенциалом (2.1). Коэффициенты a_j следует найти из условия минимума энергии.

Так как волновые функции $\varphi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$, соответствующие разным узлам, не ортогональны, среднее значение энергии не является квадратичной формой коэффициентов a_j . Однако если $a \ll b_0$, перекрытие между соседними состояниями мало. В этом случае можно ограничиться первым приближением в разложении среднего значения энергии по $a_j^* a_{j+m}$. Для зависящей от $a_j^* a_{j+m}$ части энергии получим

$$E = \sum_{j, m} a_j^* a_{j+m} I(m). \quad (2.5)$$

Величину $I(m)$ называют энергетическим интегралом перекрытия (или просто интегралом перекрытия). Мы не будем приводить для нее явных выражений. Заметим только, что в интересующих нас условиях она очень мала, так как содержит множитель $e^{-b_0/a}$ (для ближайших соседей).

Легко увидеть, что набор a_j , минимизирующий (2.5) при условии (2.4), имеет вид $a_j = (\beta)^{-1/2} e^{i k_j l}$ (β — полное число узлов примесной подрешетки). Подставив это выражение в (2.5), получим

$$E = \sum_{\mathbf{m} \neq 0} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}} I(\mathbf{m}). \quad (2.6)$$

Так как величина $I(\mathbf{m})$ убывает с ростом $|\mathbf{m}|$ экспоненциально, в (2.6) имеет смысл ограничиться ближайшими соседями. Конкретные выражения зависят от вида решетки. Например, для простой кубической решетки получаем

$$E = 2I(b_0) (\cos k_x b_0 + \cos k_y b_0 + \cos k_z b_0). \quad (2.7)$$

Энергетическая ширина разрешенной зоны V_b равна $12 |I(b_0)|$ для простой кубической и $8 |I(b_0)|$ — для простой квадратной решетки. В этих случаях выполняется правило $V_b = 2Z |I(b_0)|$, где Z — число ближайших соседей. При малых k из (2.7) получим

$$E = 6I(b_0) - I(b_0) k^2 b_0^2. \quad (2.8)$$

Величина $\hbar^2/2Ib_0^2$ в формуле (2.8) играет роль массы электрона в образовавшейся зоне. С увеличением расстояния между ближайшими соседями ширина разрешенной зоны экспоненциально уменьшается ($I(b_0) \sim e^{-b_0/a}$).

При этом масса становится экспоненциально большой. Это наводит на мысль, что в интересующем нас случае малой концентрации примесей, т. е. больших значений b_0 , зонные свойства в известном смысле являются фиктивными. Тем не менее, пока мы видим, что при сколь угодно узкой зоне волновая функция электрона является модулированной плоской волной и электрон может двигаться без рассеяния.

Зона, образованная примесями, заполнена не более, чем на половину, поскольку каждая примесь дает (или забирает) один электрон, а зона двукратно вырождена по спину. Таким образом, получается, что если примеси действительно можно считать расположеными периодически, то проводимость примесных электронов должна иметь металлический характер при сколь угодно малой концентрации примесей.

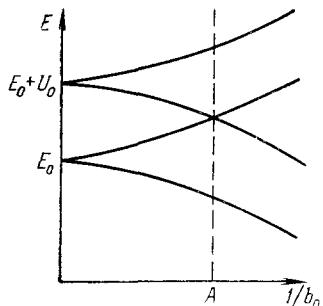


Рис. 1. Электронные зоны в зависимости от периода примесной подрешетки b_0 . Слева от точки A — диэлектрик, справа — металл.

Это утверждение является неправильным даже с оговоркой относительно периодического расположения примесей. Дело в том, что в предшествующем выводе мы пользовались одноэлектронным приближением. Это приближение, которое удовлетворительно работает при расчете широких разрешенных зон металлов, оказывается недопустимым в случае узких зон. Как видно из (2.3), волновая функция электрона вблизи каждого узла мало отличается от узельной функции $\phi(r)$. Оценим теперь энергию взаимодействия двух электронов с разными спинами, находящихся на одном узле. Она окажется порядка $U_0 \approx e^2/a$. Если величина U_0 мала по сравнению с шириной разрешенной зоны V_b , то перестройка волновых функций, связанных с взаимодействием электронов, будет незначительной. Так обстоит дело в хороших металлах. Однако в интересующем нас случае величина V_b экспоненциально мала и значительно меньше U_0 . Пусть постоянная примесной подрешетки b_0 бесконечно велика. Тогда на каждом узле имеется два электронных уровня. Электрон может иметь энергию E_0 или $E_0 + U_0$, в зависимости от того, имеется на этом узле еще один электрон или нет. При конечном значении b_0 оба уровня расплываются в зоны с шириной порядка $I(b_0)$ (рис. 1). Число мест в каждой из таких зон вдвое меньше, чем в зоне (2.6), и равно числу узлов. (В нижней зоне не может быть узла с двумя электронами.) Нижняя зона окажется заполненной, а верхняя — пустой. Таким образом, если $I(b_0) \ll U_0$, наше введение будет диэлектриком. При уменьшении b_0 в некоторой точке A ширина запрещенной зоны обращается в нуль и происходит переход диэлектрик — металл, который принято называть переходом Мотта. Вопрос о характере этого перехода и о поведении электропроводности в точке перехода до сих пор остается открытым.

Для количественного изучения перехода Мотта пользуются, как правило, моделью Хаббарда. В этой максимально упрощенной модели предполагается, что электроны отталкиваются, только если они находятся на одном узле. Гамильтониан Хаббарда имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{j, m \neq 0, \sigma} I(m) a_{j, \sigma}^\dagger a_{j+m, \sigma} + \frac{U_0}{2} \sum_{j, \sigma} n_{j, \sigma} n_{j, \sigma}, \quad (2.9)$$

где $n_{j, \sigma} = a_{j, \sigma}^\dagger a_{j, \sigma}$ — оператор чисел заполнения состояния на узле j со спином σ . Этот гамильтониан получается из (2.5) добавлением члена,

описывающего отталкивание электронов, имеющих разный спин и находящихся на одном узле.

Модель Хаббарда допускает точное решение только в одномерном случае². Результат противоречит приведенным выше качественным рассуждениям. В одномерном случае щель в спектре сохраняется при любых значениях $I(b_0)/U_0$, т. е. одномерная модель всегда является изолятором. Принято, однако, считать, что это исключительное свойство одномерных систем и что это обстоятельство не бросает тени на изложенную выше качественную картину, коль скоро она относится к двум- и трехмерным системам.

В нашу цель не входит обзор теории, развитой в связи с переходом Мотта. Изложение этих вопросов можно найти в книге Мотта³ или в обзоре Хомского⁴. Мы дали представление о переходе Мотта лишь потому, что в реальных системах чаще всего возникает такая ситуация, когда в окрестности перехода Андерсона нельзя пренебречь электрон-электронным взаимодействием, вследствие чего переход имеет и черты перехода Андерсона, и черты перехода Мотта. Разумеется, теоретически эти два явления строго различаются. Переход Андерсона существует в однодиэлектронном приближении, и в следующих разделах мы возвращаемся к этому приближению. Нужно лишь иметь в виду, что, говоря об узкой примесной зоне, мы будем всегда иметь в виду нижнюю хаббардовскую зону (см. рис. 1). Уширение этой зоны, которое может быть связано и с квантовым перекрытием и с разбросом уровней вследствие флуктуирующего классического поля, будем предполагать малым по сравнению с расстоянием до второй зоны U_0 . Поэтому, изучая структуру примесной зоны при нулевой температуре, будем считать, что на каждом узле может находиться только один электрон. Как мы видели, это следует не из принципа Паули, который допускает наличие двух электронов в одном орбитальном состоянии, а из зарядового ограничения, которое оказывается в этом случае более жестким.

3. МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА

В гл. 2 мы считали, что примеси образуют идеальную решетку. Нарушить идеальность примесной подрешетки можно несколькими способами. Самый простой способ состоит в том, чтобы считать расположение примесей случайным. Мы вернемся к нему позднее, а сейчас рассмотрим другой, более разработанный и тоже практически важный вариант разупорядочения. Допустим, что примеси находятся в узлах правильной решетки, но уровень электрона на всех узлах разный. Мы будем обозначать его ε_j , приписывая ему индекс узла. Таким образом, получаем систему периодически расположенных потенциальных ям разной глубины (рис. 2). Гамильтониан такой системы в узельном представлении получается из (2.5) добавлением члена, представляющего сумму энергий электронов, находящихся на изолированных узлах:

$$\mathcal{H} = \sum_j \varepsilon_j a_j^\dagger a_j + \sum_{j, m \neq 0} I(m) a_j^\dagger a_{j+m}. \quad (3.1)$$

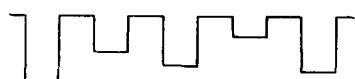


Рис. 2. Потенциальные ямы в модели Андерсона.

Энергии ε_j считаются случайными величинами, между которыми нет корреляций. Иными словами, вероятность того, что некоторый узел имеет заданную энергию, не зависит от энергий прочих узлов. Распределение энергий мы будем считать равномерным в некотором интервале W .

Функция распределения $P(\varepsilon)$ имеет вид

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

Сформулированная модель была предложена Андерсоном¹ и носит его имя. К сожалению, модель Андерсона не допускает точного решения. Несмотря на огромное количество работ по вопросу о переходе Андерсона, хорошего математического описания этого явления до сих пор не существует. Тем не менее, качественное его понимание, основанное на сравнительно простых физических концепциях, несомненно, имеется и внушает доверие. Как мы увидим, оно подтверждается также экспериментами на ЭВМ. На качественной картине явления мы остановимся в первую очередь.

Основной вопрос, который ставится при рассмотрении модели Андерсона, состоит в том, чтобы определить, являются ли волновые функции электрона локализованными в окрестности некоторого узла или они распространяются на всю систему. В обоих случаях волновая функция вблизи каждой примеси похожа на узельную, коль скоро перекрытие мало. Важно понять, образуется ли когерентное состояние, являющееся суперпозицией бесконечного числа узельных функций, входящих с примерно одинаковым весом, которое простирается на макроскопическое расстояние. Альтернативный вариант состоит в том, что узельные функции входят в суперпозицию с весом, экспоненциально убывающим по мере удаления от некоторого узла. Такое состояние называют локализованным вблизи этого узла. Если все состояния локализованы, то проводимость системы при нулевой температуре равна пулю.

Вопрос о том, как сформулировать условие локализации математическим языком, далеко не тривиален. Используют несколько различных критериев локализации. Андерсон¹ использовал следующий критерий. Допустим, что в пулевом момент времени волновая функция электрона совпадала с узельной функцией, соответствующей узлу i . Эта функция не является собственной функцией гамильтонiana (3.1), и она будет изменяться со временем. Решив уравнение Шредингера, найдем квадрат модуля волновой функции $|\Psi_i(t)|^2$ на узле i при больших временах t . Если состояния не локализованы, то начальный волновой пакет расплывается по всей системе. Поэтому в бесконечной системе $\lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi_i(t)|^2 = 0$.

Если разброс уровней отсутствует и имеется идеальная зонная структура, рассмотренная в предыдущем разделе, то расплывание волнового пакета произойдет за время порядка \hbar/V_b . Если же истинные волновые функции локализованы, то расплывания вообще не произойдет: волновая функция приобретает со временем «хвосты» на соседних узлах с экспоненциально малой амплитудой и будет сосредоточена примерно в той же области пространства, что и в начальный момент. Поэтому $\lim_{t \rightarrow \infty} |\Psi_i(t)|^2$ окажется конечной величиной. В этом и состоит критерий Андерсона.

Предлагались и другие критерии локализации. Белл и Дин⁵ рассматривали величину

$$B_\alpha = \int |\Psi_\alpha(\mathbf{r})|^4 d\mathbf{r} / \left[\int |\Psi_\alpha(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} \right]^2, \quad (3.3)$$

где Ψ_α — стационарная волновая функция гамильтонiana (3.1) в координатном представлении. Легко понять, что для делокализованных состояний величина B_α стремится к нулю как $1/\mathcal{N}^4$, где \mathcal{N} — полное число узлов в системе, а для локализованных состояний величина B_α отлична от нуля и не зависит от размеров системы.

Герберт и Джонс⁶ считали критерием локализации асимптотическое поведение недиагонального по индексу узла матричного элемента функции Грина в узельном представлении G_{0n} при больших значениях расстояния R_{0n} . Естественно считать, что для делокализованных состояний эта величина убывает как R_{0n}^{-1} , а для локализованных состояний — как $\exp[-R_{0n}/a(E)]$, где $a(E)$ — некоторый радиус локализации (см. гл. 6). Наконец, в гл. 6 мы подробно рассмотрим еще один критерий, предложенный Эдвардсом и Таулессом.

Важнейшей характеристикой примесной зоны является плотность состояний. Она определяется как число уровней, попадающих в малый интервал энергий, отнесенное к этому интервалу и к объему системы. Следует иметь в виду, что в макроскопической системе плотность состояний является непрерывной функцией энергии в некотором интервале, даже если речь идет о примесной зоне, которая представляет собой набор дискретных уровней. Таким образом, плотность состояний не содержит информации, позволяющей отличить истинную зону от набора дискретных уровней, не связанных друг с другом и случайно разбросанных в энергетическом пространстве.

Модель Андерсона содержит один безразмерный параметр W/I , где I — интеграл перекрытия для соседних узлов. Результат Андерсона, подтвержденный большим числом более поздних исследований, состоит в следующем. При достаточно больших значениях W/I все состояния являются локализованными. Существует критическое значение (W_c/I) , при котором в центре зоны впервые появляются нелокализованные состояния. При дальнейшем уменьшении W/I область делокализованных состояний увеличивается, захватывая почти всю зону (рис. 3). Любопытно, что все сказанное не относится к одномерной системе. Как показали Мотт и Туз, в одномерной системе состояния всегда являются локализованными⁷⁻¹³. Ситуация здесь аналогична ситуации с переходом Мотта, упомянутой в предыдущем разделе. Мы видим, что учет сколь угодно слабой флуктуации энергий узлов, так же как и учет электрон-электронного взаимодействия, неизбежно превращает одномерный проводник в диэлектрик.

И переход Андерсона, и переход Мотта являются разновидностями перехода металл — диэлектрик. Как мы видели, основная разница между ними состоит в том, что переход Андерсона связан с неупорядоченностью системы, а переход Мотта происходит и в идеальной периодической структуре. Кроме того, надо иметь в виду, что переход Мотта возникает вследствие электрон-электронного взаимодействия, а в теории перехода Андерсона рассматривается движение одного электрона.

Для того чтобы осмыслить результат Андерсона, рассмотрим вспомогательную задачу о двух ямах с разной глубиной, расположенных на большом расстоянии друг от друга. Такая квантовомеханическая задача легко решается. Пусть энергии электронов в каждой из ям, без учета второй ямы, равны ε_1 и ε_2 соответственно, а волновые функции равны φ_1 и φ_2 . Если ямы одинаковы, то $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$ и возникают два состояния с волновыми функциями

$$\Psi_I = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2), \quad \Psi_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 - \varphi_2). \quad (3.4)$$

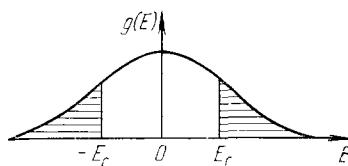


Рис. 3. Плотность состояний в модели Андерсона.

Локализованные состояния защищены полосами E_c и $-E_c$, отделяющими области локализованных и нелокализованных состояний, являющихся порогами подвижности.

Разность энергий этих состояний равна $E_1 - E_{II} = 2I$, где I — интеграл перекрытия. Важно отметить, что как бы далеко ни отстояли друг от друга эти ямы и каков бы ни был интеграл перекрытия, в обоих состояниях электрон в равной степени принадлежит каждой из ям, т. е. его можно найти в любой из них с одинаковой вероятностью. Характер решения мало меняется, если $|\varepsilon_1 - \varepsilon_2| \ll I$. В обратном предельном случае $|\varepsilon_1 - \varepsilon_2| \gg I$ картина совершенно иная. По-прежнему есть два состояния:

$$\Psi_1 = C_1\varphi_1 + C_2\varphi_2, \quad \Psi_{II} = C_2\varphi_1 + C_1\varphi_2. \quad (3.5)$$

Однако в состоянии I энергия E_1 близка к энергии ε_1 , а волновая функция близка к φ_1 . Отношение $C_2/C_1 \approx I/|\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$ и экспоненциально убывает с увеличением расстояния между ямами. Наоборот, в состоянии II энергия E_{II} близка к энергии ε_2 , а волновая функция Ψ_{II} близка к φ_2 . Таким образом, в этом случае обобществления электрона не происходит. Каждое состояние фактически представляет состояние электрона в одной из ям.

Этот пример поможет нам понять суть перехода Андерсона *). Рассмотрим некоторую полосу энергий с шириной Δ , симметричную относительно нуля, причем Δ порядка интеграла перекрытия I . Будем называть узлы, энергия которых попадает в эту полосу, резонансными, а узлы с энергией вне полосы — нерезонансными. Суть этого определения в том, что электронное состояние обобществляется между двумя резонансными узлами, если эти узлы являются ближайшими соседями. Назовем далее два резонансных узла связанными друг с другом, если они являются ближайшими соседями или если есть третий резонансный узел, который является ближайшим соседом их обоих. Два резонансных узла также связаны друг с другом, если они соединены цепочкой из связанных друг с другом резонансных узлов. Совокупность связанных между собой узлов назовем кластером. Этим кластерам будут соответствовать электронные состояния, у которых квадрат модуля волновой функции одного порядка на всех узлах, принадлежащих кластеру, и мал везде вне кластера. Следующий шаг состоит в том, что мы, вообще, выбросим из рассмотрения нерезонансные узлы. Этот шаг сомнителен. Гамильтониан Андерсона (3.1) связывает друг с другом только соседние узлы. Но два резонансных узла могут иметь общее электронное состояние и в том случае, когда между ними находится нерезонансный узел. Однако эффективный интеграл перекрытия будет при этом не порядка I , а порядка I^2/W . Если I/W мало, то связь через нерезонансный узел приведет к обобществлению состояний в значительно более узкой полосе, чем та, которую мы рассматриваем, и этим можно пренебречь. Итак, выбросив нерезонансные узлы, мы получим, что характерный размер волновой функции определяется размером кластеров из связанных резонансных узлов.

Распределение энергий ε_i в модели Андерсона считается равномерным в интервале W . По этой причине доля резонансных узлов должна быть порядка I/W . При малых значениях этого параметра резонансных узлов мало и они располагаются в основном по-одиночке. Однако при некотором критическом его значении возникает бесконечный кластер из связанных резонансных узлов, т. е. образуются пути, уходящие на бесконечность. По этим путям расплываются волновые функции электронных состояний. В этом и состоит переход Андерсона.

Теория протекания (см. обзор ¹⁵⁾) позволяет найти точное значение величины Δ/W_c , при котором образуется бесконечный кластер **). Для

*) Идея последующих рассуждений принадлежит Таулессу¹⁴⁾.

**) Последняя часть этой главы написана совместно с Б. И. Шкловским.

этого следует приравнять долю резонансных узлов Δ/W порогу протекания $x_c(s)$ для задачи узлов, т. е.

$$\frac{\Delta}{W_c} = x_c(s). \quad (3.6)$$

Значения $x_c(s)$ для различных решеток даны в таблице (рис. 4). Для двумерных и трехмерных решеток использованы данные, приведенные в обзоре¹⁵, данные для гиперрешеток заимствованы из работы Киркпатрика¹⁶.

Решетки	$x_c(s)$	$4/x_c(s)$	W_c/I	Решетки	$x_c(s)$	$4/x_c(s)$	W_c/I
Двумерные:				простая, кубическая	0,31	12,9	14,4
шестиугольная	0,70	5,7	4,3	Гиперкубические:			
квадратная	0,59	6,8	6,1	четырехмерная	0,20	20	25
треугольная	0,50	8,0	9,4	пятимерная	0,14	28,6	36
Трехмерные:							
типа алмаза	0,43	9,3	8,0				

Для того чтобы оценить критическое значение W_c/I , нужно найти связь между шириной резонансной полосы Δ и интегралом перекрытия I . В этом заключается наиболее сложный (и спорный) момент предлагаемой

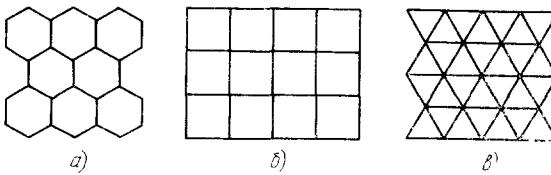


Рис. 4. Плоские решетки: шестиугольная (a), квадратная (b) и треугольная (c).

оценки. Дело в том, что само определение резонансных узлов не является точным, так как при уменьшении разности $|\varepsilon_i - \varepsilon_j|$ обобществление электронных состояний между двумя узлами происходит постепенно, а не скачком.

Тем не менее переход Андерсона происходит при вполне определенном значении W_c/I . Действительно, если волновая функция экспоненциально убывает от узла к узлу, то она не может принадлежать делокализованному состоянию. Поэтому при больших W/I все состояния локализованы. В бесконечной системе возникновение делокализованного состояния при уменьшении W/I есть четко выраженное критическое явление, которому должно соответствовать определенное пороговое значение W_c/I . Поэтому отмеченная выше неоднозначность определения резонансных узлов свидетельствует о приближенности описания, использующего понятие резонансной полосы.

Однако можно предположить некоторый способ оценки ширины и критического значения W_c/I , основанный на топологических свойствах бесконечного кластера (см.¹⁵). Вблизи порога протекания бесконечный кластер представляет собой сетку, составленную практически одномерными цепочками резонансных узлов. Если пренебречь различием энергий резонансных узлов, то окажется, что вследствие перекрытия волновых функций вдоль цепочки образуется зона шириной $4I$. Поэтому естественно считать, что ширина резонансной полосы $\Delta \approx 4I$. Подставляя это значение в (3.6),

получим следующую оценку:

$$\frac{W_c}{I} = \frac{4}{x_c(s)}. \quad (3.7)$$

Для ряда решеток значения W_c/I известны из численных экспериментов на ЭВМ. Эдвардс и Таулесс¹⁷, а также Личчарделло и Таулесс¹⁸ провели эксперименты для двумерных решеток, а Веер и Сриваастава¹⁹ — для трехмерных решеток и решеток большей размерности. Результаты этих работ собраны в табл. I. Для сравнения приведены также результаты оценки (3.7). Разумеется, предположения, сделанные при выводе (3.7), являются очень грубыми и могут вызвать возражения. (Наиболее серьезное, с нашей точки зрения, возражение, связанное с одномерностью путей протекания, обсуждается в гл. 6.) Таблица I, однако, показывает, что оценка хорошо согласуется с результатами численных экспериментов.

Итак, при $W < W_c$ в электронном спектре возникает полоса делокализованных состояний. Естественно спросить, является ли эта полоса вблизи перехода бесконечно узкой, или она сразу имеет конечную ширину? Обоснованного ответа на этот вопрос не существует. Обычно считают (см., например,¹⁸), что полоса делокализованных состояний «раскрывается» постепенно, хотя серьезных доводов в пользу такой точки зрения, на наш взгляд, нет. Более того, нам представляется, что существование сколь угодно узких делокализованных полос трудно совместить с концепцией минимальной металлической проводимости (см. гл. 6).

4. ЛОКАЛИЗАЦИЯ В МОДЕЛИ ЛИФШИЦА

В модели Андерсона потенциальные ямы разной глубины располагались в узлах правильной кристаллической решетки. Теперь мы рассмотрим в некотором смысле альтернативную модель: одинаковые потенциальные ямы, случайно расположенные в пространстве. В физической литературе эту модель иногда называют «моделью со структурным беспорядком». Будем считать потенциал ямы короткодействующим, а среднее расстояние между ямами большим не только по сравнению с радиусом действия потенциала, но и по сравнению с радиусом волновой функции, соответствующей одной яме. Впервые эта модель была подробно изучена И. М. Лифшицем^{20, 21}.

Основной вопрос, который мы хотим выяснить, состоит в том, будут ли электронные состояния в этом случае локализованными вблизи отдельных ям или они расплываются по всей системе. На первый взгляд может показаться, что поскольку все ямы одинаковые, то по терминологии гл. 3 они являются резонансными и, следовательно, должно произойти расплывание волнового пакета. Однако перекрытие волновых функций соседних ям приведет к сдвигу энергетических уровней, а поскольку у разных ям ближайшие соседи находятся на разных расстояниях, то и сдвиги окажутся разными. Казалось бы, после этого мы должны обратиться к результатам предыдущего раздела. Однако модель Андерсона нам не поможет. В ней считалось, что разброс уровней и перекрытие имеют разную природу и могут быть заданы в произвольном отношении. Если разброс значительно больше перекрытия, то состояния локализованы, а если значительно меньше, то они делокализованы. В модели Лифшица перекрытие и разброс имеют одну природу и одинаковый порядок величин. Единственный малый параметр задачи представляет отношение радиуса волновой функции к среднему расстоянию между ямами. Как мы сейчас увидим, он и помогает разобраться в этой ситуации.

Мы не будем полностью излагать математический аппарат, разработанный для этого случая Лифшицем, а рассмотрим задачи о двух и трех потенциальных ямах. Это прояснит проблему настолько, что окажется возможным объяснить основные результаты Лифшица без дальнейшей математики. Они состоят в следующем. Электронные состояния оказываются либо локализованными вблизи отдельных потенциальных ям, либо принадлежат сразу паре близлежащих ям, образуя суперпозицию вида (3.4). И те, и другие содержат экспоненциально малые примеси прочих состояний. Состояния, в которые равноправным образом входят волновые функции трех и более ям, не реализуются, так как это может быть лишь при строго симметричном расположении этих ям. Таким образом, состояния в модели Лифшица являются локализованными. Этых сведений достаточно, чтобы перейти к следующим главам. Читатель, готовому углубиться в модель Лифшица, мы предлагаем ее гамильтониан

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (4.1)$$

Допустим, что потенциал отдельной ямы $U(\mathbf{r})$ создает локализованное состояние $\Psi_0(\mathbf{r})$, имеющее энергию E_0 , и что прочие состояния, образованные этой ямой, отделены от E_0 на энергию, значительно превосходящую смещение уровня E_0 под действием других потенциальных ям. Будем считать, что $U(\mathbf{r})$ спадает гораздо быстрее, чем $\Psi_0(\mathbf{r})$, так что волновая функция в сфере действия потенциала может считаться константой. Поэтому в уравнении Шредингера член $\sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \Psi(\mathbf{r})$

заменяется членом $\sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \tau_j$, где $\tau_j = \Psi(\mathbf{r}_j)$. Тогда

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - E \right) \Psi(\mathbf{r}) + \sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \tau_j = 0, \quad (4.2)$$

где E — искомая энергия, или

$$\Psi(\mathbf{r}) = \left(E - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right)^{-1} \sum_j U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \tau_j. \quad (4.3)$$

Разложив правую часть в ряд Фурье, найдем

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j F(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \tau_j, \quad (4.4)$$

где

$$F(E, \mathbf{r}) = \int \frac{c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{k}}{E - (\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m)}, \quad (4.5)$$

$$U(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}.$$

Положив $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$, получим систему линейных однородных уравнений

$$\tau_i - \sum_j F(E, \mathbf{r}_i j) \tau_j = 0 \quad (4.6)$$

($\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$), условие разрешимости которой и определяет энергию E .

Если есть всего одна яма, то энергия уровня E_0 определяется уравнением

$$1 - F_0(E_0) = 0, \quad (4.7)$$

где

$$F_0(E_0) = \int \frac{c(\mathbf{k}) d\mathbf{k}}{E - (\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m)}. \quad (4.8)$$

Подробный анализ уравнения (4.7) читатель найдет, например, в книге Коссевича²². Волновая функция электрона в одной яме $\Psi_0(\mathbf{r})$ определяется из (4.4):

$$\Psi_0(\mathbf{r}) = \Psi_0(0) F(E_0, \mathbf{r}). \quad (4.9)$$

При больших r в интеграле (4.5) можно заменить $c(\mathbf{k})$ на $c(0)$, и мы получим

$$F(E_0, \mathbf{r}) = -A \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad (4.10)$$

$$A = (2\pi)^2 \frac{mc(0)}{\hbar^2}, \quad \alpha^2 = -\frac{2mE_0}{\hbar^2}.$$

что и определяет асимптотику волновой функции.

Теперь напишем условие разрешимости системы (4.6), определяющее энергию E в потенциале большого числа ям. Мы предположим, что величина $\varepsilon = E_0 - E$ мала по сравнению с расстоянием до следующего уровня одной ямы, и произведем разложение в (4.8). Для диагональных членов (4.6), воспользовавшись (4.7), получим

$$1 - F_0(E) = Be, \quad (4.11)$$

где

$$B = \int \frac{dk c(\mathbf{k})}{(E(\mathbf{k}) - E_0)^2}.$$

Для недиагональных членов воспользуемся формулой (4.10), так как среднее расстояние между ямами $N^{-1/3} \gg \alpha^{-1}$. В результате получим следующее уравнение для энергии ε^{21} :

$$\text{Det} \left[\varepsilon \delta_{ij} + \lambda \frac{e^{-\alpha r_{ij}}}{r_{ij}} (1 - \delta_{ij}) \right] = 0, \quad (4.12)$$

где $\lambda = A/B$. Для случая двух ям, находящихся на расстоянии r , оно легко решается:

$$\varepsilon_{1,2} = \pm \lambda \frac{e^{-\alpha r}}{r}. \quad (4.13)$$

Волновые функции имеют вид

$$\Psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \pm \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)], \quad (4.14)$$

где $\Psi_0(\mathbf{r})$ определяется (4.9). Таким образом, электронные состояния в равной мере принадлежат обеим ямам, а сдвиг уровней экспоненциально падает с расстоянием между ямами.

Теперь мы рассмотрим три ямы, находящиеся на одной прямой, как это показано на рис. 5. Расстояние r_{12} будем считать фиксированным и посмотрим, как меняются энергии уровней в зависимости от r_{23} . Каждый из трех корней уравнения (4.12) представим в виде

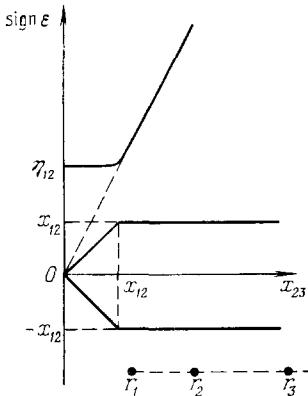
$$\varepsilon = \varepsilon_0 e^s, \quad (4.15)$$

Рис. 5. Уровни энергии для трех потенциальных ям как функции расстояния $r_{23} = -x_{23}/\alpha$ (точка η_{12} соответствует $2x_{12}$).

где ε_0 — степенная функция от r_{12} , r_{23} , которой мы не будем интересоваться, сосредоточив внимание на экспоненциальной зависимости. Зависимость s от $x_{23} = \alpha r_{23}$ для каждого корня уравнения (4.12) изображена на рис. 5. Если $r_{23} > r_{12}$, то состояния классифицируются следующим образом. Два состояния обобществлены между ямами 1 и 2 и имеют волновые функции (4.14). Из энергии определяются (4.13) и $s = x_{12}$. Третья яма на эти состояния практически не влияет. Она имеет собственное состояние с волновой функцией $\Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_3)$ и $s = 2x_{23}$. Следует обратить внимание на тот факт, что сдвиг уровня в резонансной ситуации, когда электрон обобществляется между двумя ямами, пропорционален интегралу перекрытия ($s = x_{12}$), а в нерезонансной ситуации — его квадрату ($s = 2x_{23}$).

Совершенно аналогично при $r_{23} < r_{12}$ возникает дублет, обобществленный ямами 2 и 3 с $s = x_{23}$, и состояние в яме 1 с $s = 2x_{12}$. Суть дела состоит в том, что если, например, ямы 1 и 2 близки друг к другу, то их состояния обобществляются, а два возникающих при этом уровня так сильно «отталкиваются» друг от друга, что выходят из резонанса с третьим уровнем.

Состояние, которое в равной мере принадлежит всем трем ямам, возникает, только если $r_{12} = r_{23}$. Важно понять, что максимально допустимое отклонение от этого равенства, при котором состояния все еще обобществлены, равно радиусу состояния α^{-1} . Это и является ключом к пониманию ситуации в целом. Дело в том, что среднее расстояние между примесями гораздо больше α^{-1} . По этой причине вероятность упорядоченных конфигураций ничтожно мала, и в системе из любого числа ям состояния будут представлять собой синглеты и дублеты с волновыми функциями (4.9) и (4.14). Таким образом, возможность расплывания волнового пакета по зоне совершенно исключена.



Легко понять, как выглядит плотность состояний в модели Лифшица. Очевидно, что характерная энергия разброса уровней (ширина примесной зоны, если потенциальные ямы связаны с примесями) порядка

$$\Delta = \lambda N^{1/3} \exp(-\alpha N^{-1/3}). \quad (4.16)$$

Эта оценка получается, если подставить в (4.13) вместо r среднее расстояние между ямами (N — концентрация ям). Заметим, что плотность состояний имеет минимум в точке $\varepsilon = 0$. Действительно, малые сдвиги уровня $\varepsilon \ll \Delta$ имеют лишь такие состояния, вокруг которых нет других ям на расстоянии, много большем, чем среднее расстояние между ямами. Но вероятность таких разрежений мала. Таким образом, плотность состояний представляет собой двугорбую кривую с минимумом при $E = E_0$ и с шириной каждого горба порядка Δ .

Итак, электронные состояния в модели Лифшица должны быть локализованными. Разумеется, этот вывод является следствием предположения о том, что среднее расстояние между ямами велико по сравнению с радиусом волновой функции ($\alpha N^{-1/3} \gg 1$). При значениях $\alpha N^{-1/3}$ порядка единицы делокализованные состояния возникают и в модели Лифшица. В двухмерном случае этот переход был прослежен с помощью ЭВМ²³, однако четко определить критическое значение $\alpha N^{-1/3}$ не удалось.

5. ПРИМЕРЫ ПЕРЕХОДОВ АНДЕРСОНА

На представлениях о переходе Андерсона основана важнейшая концепция теории неупорядоченных систем — концепция порога подвижности. Особую роль эта концепция играет в теории аморфных полупроводников. Согласно современной теории зонная структура аморфного полупроводника имеет вид, изображенный на рис. 6.

Наличие ближнего порядка приводит к тому, что сохраняется понятие о разрешенных и запрещенных зонах. Однако многочисленные структурные нарушения создают «хвост» плотности состояний в запрещенной зоне, так что границы зон (в смысле обращения в нуль плотности состояний) оказываются размытыми. Уменьшение плотности состояний приводит к тому, что состояния в запрещенной зоне оказываются локализованными, и, в некотором смысле, пороги локализации и играют роль зонных границ. Уровень Ферми находится в области локализованных состояний, и потому перенос заряда осуществляется путем теплового заброса носителей в область делокализованных состояний или путем активированных прыжков по локализованным состояниям (см. книгу Мотта и Дэвиса²⁴). И тот, и другой способ приводят при низких температурах к экспоненциальному росту сопротивления с температурой. Утверждение о строгой локализации электронных состояний играет при этом очень важную роль. Если бы существовала возможность расплывания волнового пакета, то было бы возможно безактивационное движение электрона в электрическом поле. При достаточно низкой температуре такой механизм переноса имел бы несомненное преимущество, и электропроводность перестала бы зависеть от температуры.

Важным приложением идей, изложенных в предыдущих разделах, является также вопрос о переходе металл-диэлектрик в легированных полупроводниках. Как известно, в сильно легированных полупроводниках проводимость при низких температурах носит металлический характер в том смысле, что она слабо зависит от температуры (по порядку величины эта проводимость, разумеется, значительно меньше проводимости типичных металлов). Условие сильного легирования (см. обзоры^{25,26}) имеет вид $Na^a \gg 1$, где N — концентрация примесей, а a — боровский радиус примесного состояния. При выполнении этого условия электронный газ оказывается почти идеальным. Энергии взаимодействия электронов с примесями и друг

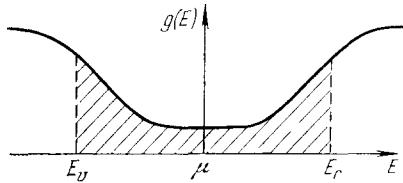


Рис. 6. Плотность состояний в аморфном полупроводнике.
Локализованные состояния заштрихованы.

с другом становятся значительно меньшими, чем энергия Ферми. При малых же концентрациях примесей носители тока оказываются локализованными. Действительно, при низких температурах в полупроводнике *n*-типа электроны находятся на донорах. Отсутствие электрона на одном из доноров будет представлять собой элементарное возбуждение. Естественно поставить вопрос о спектре возбуждений и о плотности состояний. При этом необходимо учитывать, что возбуждение может находиться на любом из доноров. Если пренебречь потенциалом, который создают нейтральные доноры, то мы придем к модели Лифшица, обсуждавшейся в предыдущем разделе. Отсюда следует, что состояния должны быть локализованными. Это означает, что при пулевой температуре дырка, возникшая на одном из доноров, не может переместиться на другой донор. Таким образом, низкотемпературная проводимость должна носить активацационный характер, т. е. экспоненциально падать с температурой. Потенциал нейтральных доноров создает разброс дырочных уровней, степенным образом зависящий от концентрации примесей. С другой стороны, ширина примесной зоны в модели Лифшица (формула (4.10)) связана с перекрытием и падает с концентрацией экспоненциально. Поэтому при малых концентрациях пренебречь потенциалом нейтральных доноров нельзя. Однако, как мы знаем из анализа модели Андерсона, разброс уровней лишь способствует локализации состояний.

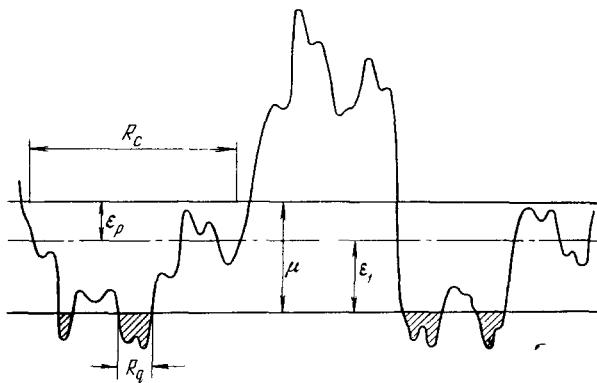


Рис. 7. Так, согласно Шкловскому и Эфросу²⁸ может выглядеть потенциальная энергия электрона в компенсированном полупроводнике.

Области, занятые электронами, заштрихованы.

При увеличении концентрации примесей должен произойти переход от активацационной проводимости к металлической. Практически он происходит при $Na^3 \approx 0,02$ (см. обзор²⁷). (В *p*-Ge, например, при концентрации 10^{17} см^{-3} .) Этот переход принято называть переходом Мотта, хотя он далеко не тождествен с переходом, описанным в гл. 2. Главное отличие состоит в том, что в рассматриваемом случае состояния в диэлектрической фазе оказываются локализованными, что является признаком перехода Андерсона. С другой стороны, это, конечно, и не переход Андерсона, поскольку электронное взаимодействие, несомненно, играет первостепенную роль вблизи перехода. В точке перехода радиус электронного экранирования сравнивается с боровским радиусом, что и приводит к уничтожению связанных состояний на примесях.

Настоящим переходом Андерсона является, по-видимому, переход металл — диэлектрик в сильно легированных полупроводниках под действием компенсации. Допустим, что в сильно легированном полупроводнике *n*-типа имеется компенсирующая примесь (акцепторы) с концентрацией N_A , очень близкой к концентрации доноров N . При низких температурах все акцепторы забирают по одному электрону от доноров и заряжаются отрицательно. Оставшиеся электроны с концентрацией $n = N - N_A$ находятся в зоне проводимости и подвергаются действию потенциала, созданного донорами и акцепторами. Как уже говорилось, в сильно легированном полупроводнике при малых степенях компенсации, когда $n \approx N$, потенциал примесей мал по сравнению с энергией Ферми μ . Однако если $N_A \rightarrow N$, а n уменьшается, энергия Ферми падает, а потенциал растет, поскольку ослабляется электронное экранирование. Теория сильно компенсированных полупроводников развита в работах Шкловского и Эфроса²⁸⁻²⁹. Полученная ими энергетическая схема представлена на рис. 7. Кривая линия представляет дно зоны проводимости, искаженное потенциалом примесей (в координатном пространстве). Если корреляция в расположении примесей отсутствует, максимальный размер и амплитуда флюктуаций потенциала опре-

деляются электронным экранированием. Однако ясно, что экранирование в такой ситуации совершенно не похоже на лебаевское. Оказалось, что роль радиуса экранирования играет длина $R_c = N^{1/3}/n^{2/3}$. Амплитуда флюктуаций потенциальной энергии электрона порядка $e^2 N^{2/3}/\kappa n^{1/3}$ (κ — диэлектрическая проницаемость). Электроны образуют металлические капли, изолированные друг от друга и расположенные в самых глубоких местах потенциального рельефа. Характерный размер капель

$$R_q = a(Na^3)^{-1/9} \ll R_c.$$

Электроны, находящиеся на уровне Ферми, локализованы в областях порядка R_q . С повышением энергии радиус локализации электронных состояний возрастает, и, наконец, при энергии, равной энергии протекания, ε_p , состояния делокализуются. Электроны, имеющие энергию большую, чем ε_p , могут передвигаться на макроскопические расстояния, оставаясь все время в классически разрешенных областях. Энергия ε_p определяется из решения так называемой континуальной задачи теории протекания¹⁵. Проводимость осуществляется путем теплового заброса электронов на уровень протекания. Соответствующая этому процессу энергия активации ε_1 изображена на рис. 7. (При совсем низких температурах энергия активации уменьшается за счет увеличения роли туннелирования, однако проводимость при нулевой температуре строго равна нулю.) При увеличении концентрации электронов n уровень Ферми растет, а когда он достигает энергии протекания, происходит переход металл — диэлектрик. По существу, этот переход является квазиклассическим вариантом перехода Андерсона. Впервые такой вариант перехода рассмотрел Займан³⁰.

Весьма важным оказался также вопрос об андерсоновской локализации в теории МДП-структур. Эта структура (металл, диэлектрик, полупроводник) чаще всего представляет собой пленку двуокиси кремния (диэлектрик), находящуюся между подложкой из кремния (полупроводник) и плоским металлическим электродом. Приложенный к металлу потенциал изгибает зоны и перераспределяет заряд таким образом, что на поверхности полупроводника возникает узкий инверсионный слой, т. е. слой с носителями тока, другого знака, чем в объеме (рис. 8). Изменяя приложенный потенциал, можно менять концентрацию носителей в инверсионном слое, а следовательно, и поверхностную проводимость слоя, в весьма широких пределах. На этом и основано действие полевого транзистора, представляющего собой такую структуру. Инверсионный слой заполнен двумерным электронным газом, находящимся в случайном потенциале, который создается главным образом за счет неоднородностей диэлектрической пленки. Согласно идеям Мотта³¹ и Штерна³² в этом потенциале и происходит андерсоновская локализация носителей. При малых концентрациях носителей проводимость инверсионного слоя носит активационный характер, причем при низких температурах энергия активации уменьшается с температурой. Это означает, что в окрестности уровня Ферми находятся локализованные состояния, по которым происходят перескоки. При увеличении концентрации носителей уровень Ферми оказывается в области делокализованных состояний и проводимость носит металлический характер (подробное обсуждение обширного экспериментального материала см. в обзоре Мотта и др.³³). Простой способ изменения концентрации с помощью приложенного напряжения позволяет сравнительно легко исследовать электропроводность вблизи порога Андерсона. При этом возникает еще одна интересная теоретическая проблема, к обсуждению которой мы сейчас и переходим.

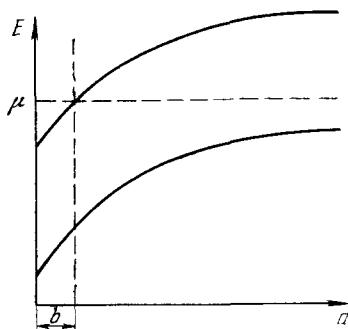


Рис. 8. Зонная схема вблизи поверхности полупроводника в МДП-структуре.

d — расстояние от поверхности,
 b — ширина инверсионного слоя.
Штриховой линией и показан уровень Ферми.

6. ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ОКРЕСТНОСТИ ПЕРЕХОДА АНДЕРСОНА

Допустим, что уровень Ферми приближается к андерсоновскому порогу сверху. Спрашивается, обращается ли электропроводность при нулевой температуре в нуль скачком или непрерывным образом (рис. 9)?

Строго обоснованного ответа на этот вопрос нет. Ниже излагается близкая нам точка зрения Мотта^{34, 36}, которая, по-видимому, занимает господствующее положение в литературе, хотя неоднократно подвергалась критике (см. ³⁷⁻³⁹).

Допустим, что уровень Ферми находится посередине разрешенной зоны. Если беспорядок мал и электроны почти свободные, то проводимость выражается обычной формулой Друде

$$\sigma = \frac{e^2 k_F^2 l}{3\pi^2 \hbar}, \quad (6.1)$$

Рис. 9. Электропроводность при нулевой температуре как функция положения уровня Ферми μ .

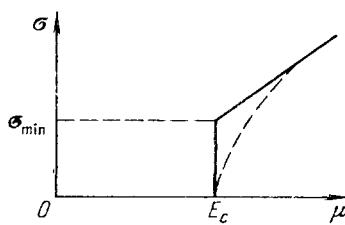
В точке, где уровень Ферми пересекает порог локализации E_c , электропроводность должна обратиться в нуль. Но происходит ли это скачком (сплошная кривая) или плавно (штриховая)?

в комму смыслу не может быть меньше длины волны электрона. В случае зоны, заполненной наполовину, $k_F \sim a_0^{-1}$, где a_0 — постоянная решетки, и утверждение $k_F l = l/a_0 > 1$ является совершенно прозрачным. Из него следует, что электропроводность не может быть меньше величины

$$\sigma_{\min} = \frac{C_3 e^2}{\hbar a_0}, \quad (6.2)$$

где C_3 — константа. Концепция Мотта состоит, по существу, в том, что при нулевой температуре электронный газ не может обладать никакой другой проводимостью, кроме той, которая описана в курсах общей физики и по порядку величины выражается формулой (6.1). Но такая проводимость имеет минимально допустимое значение (6.2). Отсюда Мотт делает вывод, что при увеличении беспорядка (например, при увеличении величины W в модели Андерсона) проводимость уменьшается, достигая величины (6.2), после чего скачком обращается в нуль (см. рис. 9). В литературе эта точка зрения получила название «концепция минимальной металлической проводимости». Разумеется, если говорить микроскопическим языком, то причина, по которой проводимость обращается в нуль, состоит в андерсоновской локализации и точка, в которой это происходит, соответствует андерсоновскому порогу.

Следует заметить, что, строго говоря, концепция минимальной металлической проводимости противоречит представлениям о переходе Андерсона, основанным на теории протекания, приведенным в гл. 3. Действительно, в духе этих представлений можно рассуждать следующим образом. Рассмотрим цепочку из резонансных узлов, пронизывающих весь образец, на которых отлична от нуля волновая функция делокализованного состояния. Естественно думать, что по этим цепочкам и течет электрический ток. В предыдущих рассуждениях, касающихся длины свободного про-



бега l , фигурирующей в (6.1), молчаливо предполагалось, что система является однородной. Однако вблизи перехода это предположение едва ли можно считать правильным. Более того, ясно, что наши цепочки выбраны именно таким образом, чтобы вдоль них длина свободного пробега оставалась относительно большой. В результате цепочки играют роль металлических нитей в диэлектрическом образце. При приближении к точке перехода число нитей, пронизывающих единичную площадь, степенным образом обращается в нуль. Вследствие этого электропроводность должна обращаться в нуль непрерывно, а не скачком. Именно так дело обстоит в двухкомпонентных системах, представляющих смесь металла с диэлектриком, если концентрация металлической компоненты близка к порогу протекания¹⁵.

Такого рода возражения против концепции минимальной металлической проводимости выдвигались в работах³⁷⁻³⁸. Недостаток этих рассуждений состоит, на наш взгляд, в следующем. Вблизи порога протекания резонансные цепочки становятся одномерными на значительной длине. Но, как указывалось в гл. 3, в одномерной системе сколь угодно малые флуктуации приводят к локализации. Таким образом, описанного выше механизма, при котором электропроводность могла бы быть сколь угодно малой, но не зависящей от температуры, по-видимому, не существует.

Эти соображения свидетельствуют также о том, что представления, основанные только на теории протекания, не могут адекватно описывать переход Андерсона. Можно, однако, надеяться, что одномерный характер путей протекания станет существенным лишь вблизи самого перехода, и это не сильно повлияет на оценки W_c/I , сделанные в гл. 3.

В модели Андерсона константа C_3 в (6.2) по оценке Мотта и др.³³ лежит в пределах 0,025—0,1 (для различных решеток). Поэтому σ_{\min} заключена в пределах 250 — $1000 \text{ } \text{ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$.

Особый интерес приобретает концепция минимальной металлической проводимости в двумерном случае. В этом случае

$$\sigma_{\min} = \frac{C_2 e^2}{\hbar}, \quad (6.3)$$

и в качестве размерных величин в σ_{\min} входят только универсальные константы. Это дает основания надеяться, что константа C_2 также является универсальной и не зависит от рассматриваемой модели. Это подтверждается изящными аргументами типа скейлинга, приведенными Личчарделло и Таулессом⁴¹. Те же авторы^{18, 41} произвели расчет методом Монте-Карло на ЭВМ, подтвердивший факт существования минимальной металлической проводимости. Они нашли, что $C_2 = 0,12 \pm 0,03$ (это соответствует $\sigma_{\min} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ } \text{ом}^{-1}$) и что в рамках модели Андерсона C_2 не зависит от вида решетки для трех двумерных решеток, представленных в таблице. Более того, величина C_2 оказалась не зависящей от отношения I/W , при увеличении которого пороги локализации смешались от центра зоны к ее краям (см. рис. 11). Нам представляется, что желающим понять физику андерсоновского перехода имеет смысл вникнуть в идею этих расчетов, и потому ниже мы остановимся на них подробнее. Однако предварительно мы заметим, что согласно³³ результаты численных расчетов находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными по минимальной металлической проводимости, полученными на МДП-структурех.

Основные идеи вычисления электропроводности двумерной системы вблизи порога локализации восходят к работе Эдвардса и Таулесса¹⁷. Рассмотрим квадрат со стороной L , содержащий J' узлов решетки с еди-

ничным периодом. В соответствии с моделью Андерсона примем, что энергия электрона на каждом узле есть случайная величина, равномерно распределенная в интервале W . Для того чтобы найти уровни энергии, необходимо решить уравнение Шредингера с гамильтонианом (3.1). При этом необходимо использовать какие-либо граничные условия. Будем считать их один раз периодическими $a_R = a_{R+L}$, другой раз — антипериодическими, $a_R = -a_{R+L}$, и найдем сдвиг уровней ΔE , соответствующий изменению граничных условий.

Рассмотрим теперь величину $\mathcal{N} \Delta \bar{E} g(E)$, где $\Delta \bar{E}$ — средний геометрический сдвиг уровней в некотором интервале энергий, а $g(E)$ — плотность состояний в этом же интервале. Чему равна эта величина в пределе

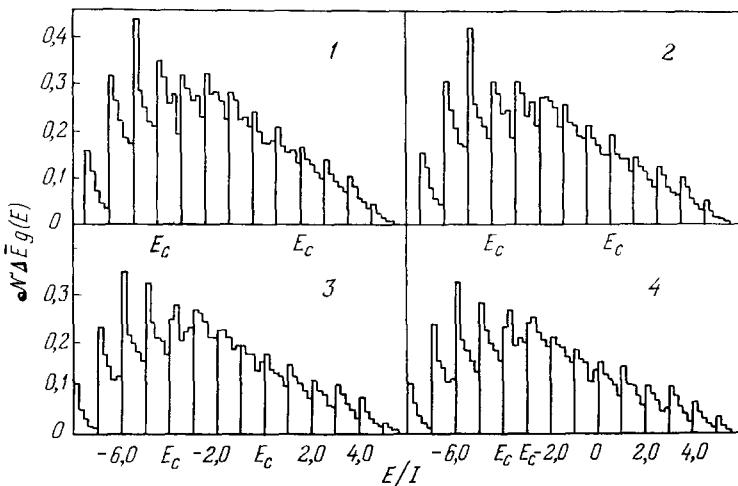


Рис. 10. Зависимость $\mathcal{N} \Delta \bar{E} g(E)$ от энергии для треугольной решетки.

Значения $W/I = 8.0$ (1), 8.5 (2), 9.0 (3) и 9.5 (4). В каждом энергетическом интервале показаны значения $\mathcal{N} \Delta \bar{E} g(E)$ для $\mathcal{N} = 36, 64, 100, 144, 196$, расположенные соответственно слева направо. Буквой E_c обозначены верхняя и нижняя границы локализованных состояний.

$\mathcal{N} \rightarrow \infty$? Легко понять, что если рассматриваемый интервал энергий находится в области локализованных состояний, то эта величина экспоненциально обращается в нуль. Действительно, если волновая функция рассматриваемых состояний обращается в нуль как $e^{-R/a}$, то сдвиг уровней при изменении граничных условий также должен быть экспоненциально малым $\Delta E \sim \exp(-L/a)$. Плотность состояний $g(E)$ является величиной конечной, и потому

$$\lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \mathcal{N} \Delta \bar{E} g(E) = 0. \quad (6.4)$$

Нетривиальное утверждение состоит в том, что в области нелокализованных состояний

$$\lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \mathcal{N} \Delta \bar{E} g(E) = \frac{2\sigma\hbar}{e^2 f}, \quad (6.5)$$

где σ — двумерная удельная электропроводность системы, возникающая, когда уровень Ферми имеет значение E , e — заряд электрона, а f — коэффициент, зависящий от вида решетки. Для квадратной решетки $f = 1$, для гексагональной $f = \sqrt{3}$, а для треугольной решетки $f = \sqrt{3}/2$.

Изящное доказательство формулы (6.5), основанное на формуле Кубо — Гринвуда, дано в работах^{17, 18}. Мы ограничимся здесь лишь качественной интерпретацией. Если длина свободного пробега много меньше расстояния до границы L , то сдвиг уровней ΔE для нелокализованных электронов порядка \hbar/τ , где τ — время, необходимое электрону, чтобы продиффундировать до границы. Согласно уравнению диффузии $L^2 = D\tau$, где D — коэффициент диффузии. С другой стороны, электропроводность связана с коэффициентом диффузии обычным соотношением $e^2 D g(E) = \sigma$. Комбинируя эти формулы и учитывая, что для решетки с единичным периодом $L^2 = J^2$, легко получить порядковое соотношение типа формулы (6.5).

Итак, в двумерном случае критерий локализации состоит в переходе от формулы (6.5) к формуле (6.4). На рис. 10 представлены результаты Личчарделло и Таулесса¹⁸ для треугольной решетки. Авторы считали, что в заданном интервале энергий состояния локализованы, если $\sqrt{\Delta E} g(E)$ монотонно убывает с ростом J от $J = 36$ до $J = 196$. Если же в этом интервале энергий монотонность нарушалась, авторы считали, что там состояния делокализованы. На рис. 11, также заимствованном из работы¹⁸, показаны полученные таким образом пороги локализации, электропроводность в области делокализованных состояний и вычисленная обычным образом плотность состояний. Привлекает внимание, что этот рисунок не похож на рис. 3, на котором схематически изображено то же самое. Согласно¹⁸ область делокализованных состояний возникает не в центре зоны и не в максимуме плотности состояний. Прокомментировать этот факт трудно. Возможно, что точность определения порога оказалась недостаточной, а возможно, что мы еще не понимаем каких-либо важных черт этого, несомненно, очень сложного явления — см. ⁶⁰.

Относительно концепции минимальной металлической проводимости следует также иметь в виду следующее. Все описанные выше рассуждения и расчеты велись в одноэлектронном приближении. Очень важный момент этих рассуждений состоит в том, что плотность состояний на уровне Ферми считалась отличной от нуля постоянной величиной. Как показано в работах^{42, 43}, электрон-электронное взаимодействие приводит к обращению в нуль плотности состояний на уровне Ферми. В связи с этим обстоятельством вопрос о минимальной металлической проводимости требует дополнительного обсуждения.

Мы переходим теперь к другому важному аспекту теории перехода Андерсона, а именно — к вопросу о поведении волновых функций при энергиях, близких к критической энергии E_c , разделяющей локализованные и делокализованные состояния. Из общих принципов квантовой механики следует, что поведение волновых функций не может измениться

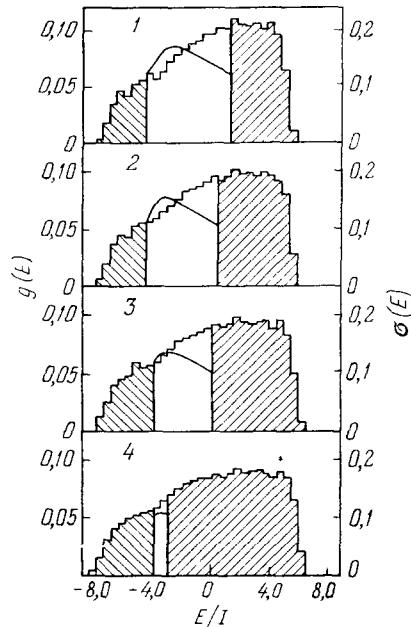


Рис. 11. Гистограмма плотности состояний для 100 образцов, состоящих из 100 узлов треугольной решетки. Значения W/I те же, что на рис. 10. Области локализованных состояний защищированы. Сплошными кривыми в делокализованных областях показана электропроводность (в единицах e^2/h).

при малом изменении энергии скачком. Локализованные состояния, отделенные от делокализованных состояний очень малой энергией, должны иметь большой радиус локализации, ибо именно энергия $E_c - E$ определяет затухание локализованных состояний в классически запрещенных областях.

Рассмотрим, например, потенциальную яму и допустим, что вследствие уменьшения ее глубины какое-либо связанное состояние «выталкивается» в непрерывный спектр. При этом неизбежно радиус локализации этого состояния обращается в бесконечность как $E^{-1/2}$, где E — энергия, отсчитанная от границы непрерывного спектра. Поэтому следует

принять, что радиус локализованных состояний $a(E)$ ведет себя вблизи порога по закону

$$a(E) = \frac{a_0}{|E_c - E|^s}, \quad (6.6)$$

где s — неизвестный критический индекс. Следует иметь в виду, что соответствующие волновые функции осциллируют в масштабах порядка постоянной решетки и лишь их огибающая ведет себя как $e^{-r/a(E)}$ (рис. 12).

Вопрос о величине критического индекса s до сих пор окончательно не решен.

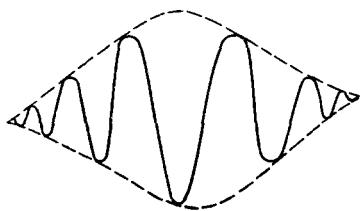
Рис. 12. Волновая функция вблизи перехода Андерсона.

Если бы речь шла о простой потенциальной яме, где считается, что потенциал на достаточно большом расстоянии от ямы есть константа, то естественный ответ состоял бы в том, что $s = 1/2$. Именно это и предположили в первую очередь Мотт и Дэвис (см. ²⁴, с 49). Однако серьезных оснований для такого предположения нет. В 1972 г. Андерсон ⁴⁴, используя результаты теории самоизбегающих путей, показал, что наиболее вероятная функция Грина убывает с расстоянием как $e^{-R/a(E)}$, где $a(E)$ выражается формулой (6.6) с $s = 0,6$. Следует, однако, заметить, что аргументация Андерсона, с помощью которой задача об асимптотике наиболее вероятной функции Грина сводится к задаче об самоизбегающих путях, содержит ряд далеко не очевидных предположений. Любопытно, тем не менее, что Абрам и Эдвардс ⁴⁵ получили тот же результат из совершенно других соображений. Фрид ⁴⁶⁻⁴⁷ получил близкий, но не тождественный результат $s = 2/3$. Близкий результат получил также Садовский ⁴⁸, который, используя аргументацию Андерсона и теорию самоизбегающих путей, развитую де Женом ⁴⁹, нашел, что индекс s совпадает с индексом радиуса корреляции обычной теории критических явлений.

Вполне естественно считать, что индекс s не зависит от конкретной модели неупорядоченной системы, но зависит от числа измерений пространства. Приведенные выше значения индексов относились к трехмерному случаю. Абрам ⁵⁰ нашел, что в двумерном случае $s = 0,75$. Наконец, Ласт и Таулесс предположили, что в трехмерном случае непосредственно вблизи энергии E_c существует область энергий, где волновые функции убывают с расстоянием степенным образом ⁵¹. В этой же работе сделан численный эксперимент, свидетельствующий в пользу этого предположения.

7. НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ТЕОРИИ ПЕРЕХОДА АНДЕРСОНА. РАЗГОВОР С ТЕОРЕТИКОМ О ТЕОРИИ

Теоретик. Я прочитал рукопись твоего обзора. Может быть, это для кого-нибудь и хорошо, но мне не очень понравилось. Здесь у тебя одни слова, а слова я плохо понимаю. Неужели нельзя хоть что-нибудь увидеть из формул? Пусть, как ты говоришь, удовлетворительной теории



нет, но ведь что-то наверное есть? Ты сообщаешь множество разных результатов. Раз они известны, то их как-то получили? Ну, и сам факт существования перехода Андерсона? Откуда он известен? Не из твоих же резонансных полосок. Между прочим, я видел работы на эту тему. Сам я их, правда, не разбирал, но выглядели они вполне солидно. А ты о них ничего не написал.

Автор. Твой упрек справедлив. В свое оправдание я могу сказать только, что старался сделать обзор максимально простым и ясным. Впрочем, как видно из твоих слов, эти понятия весьма субъективны. Кроме того, мне кажется, что аналитические методы в теории перехода Андерсона еще не достаточно развиты. Тем не менее мне, конечно, следовало рассказать о шагах, сделанных в этом направлении, тем более, что с них все и начиналось. Основополагающая работа Андерсона¹ как раз и содержала тот метод, которым пользовались почти во всех работах, упомянутых тобой.

Теоретик. Ну и что же там было?

Автор. Да то самое, что ты, вероятно, хочешь. Функция Грина в узельном представлении, разложение в ряд теории возмущений, первое разложение, учитывющее многократное рассеяние на одном узле...

Теоретик. Конечно, конечно! Я убежден в том, что если что-то действительно происходит, то это обязательно должно быть видно из теории возмущений! В каком-нибудь порядке что-нибудь обязательно должно обратиться в нуль или в бесконечность. Я хотел сам это посмотреть перед разговором с тобой, но не успел. Впрочем, это должно быть очень просто. Ведь что ты утверждаешь... Ты говоришь, что переход между состояниями, принадлежащими разным узлам, невозможен. Тогда состояния будут строго локализованы. Прекрасно, это означает, что при некотором значении энергии, лежащем на вещественной оси, мнимая часть собственной энергии одночастичной функции Грина должна обратиться в нуль. Эта энергия и будет являться порогом перехода Андерсона. Верно?

Автор. В общем, верно. Только...

Теоретик. Ты хочешь сказать, что функция Грина G_{in} в узельном представлении, вообще говоря, недиагональна по индексу узла i . Поэтому непонятно, о какой именно функции я говорю?

Автор. Да нет, дело в том...

Теоретик. Разумеется, я говорю о диагональной по индексу узла функции Грина. Назовем ее G_{00} .

Автор. Ты думаешь, что выбор этого узла здесь не существенен?

Теоретик. Нет, конечно. После усреднения все узлы станут эквивалентными. Странно слышать такой вопрос от специалиста по неупорядоченным системам (пауза). Фактически нужно просто написать ряд для вероятности ухода с данного узла на любой другой узел. В точке перехода, если ты прав и таковая действительно существует, этот ряд должен обратиться в нуль. Вот и все. Начнем с анализа первого члена ряда. Во втором порядке теории возмущений... Позвольте, позвольте... Вот так помер! Никогда эта вероятность в нуль не обратится. Нет, я совсем перестал тебя понимать и совершенно с тобой не согласен.

Автор. Почему?

Теоретик. Послушай меня пять минут, и ты все поймешь без объяснений. Во втором порядке теории возмущений имеем

$$V = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle \sum_m |I(m)|^2 \delta(\varepsilon_0 - \varepsilon_m) \right\rangle; \quad (7.1)$$

здесь V — вероятность перехода. Сумма ведется по ближайшим соседям узла 0, а $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по всем значениям энергии ε_m . Какой вид имела у тебя функция распределения энергий? Ага, это формула

(3.2). Прекрасно! Выполним усреднение в (7.1):

$$V = \frac{2\pi}{\hbar} \int_m P(\varepsilon) |I(m)|^2 \delta(\varepsilon_0 - \varepsilon) d\varepsilon. \quad (7.2)$$

Воспользуемся (3.2) и получим

$$V = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\sum_m |I(m)|^2}{W}. \quad (7.3)$$

Итак, в противоположность тому, что ты говорил, эта величина не обращается в нуль ни при каких конечных значениях I/W . Более того, я ясно вижу, что то же самое имеет место и во всех порядках теории возмущений. Что ты на это скажешь?

Автор. Вероятно, ты прав.

Теоретик. Но это означает, что никакого перехода нет!

Автор. Посмотри внимательно на формулу (7.1), которую ты написал. Там ведется суммирование по узлам, являющимся ближайшими соседями узла 0. Как ты думаешь, какова вероятность того, что среди соседей найдется узел с энергией $\varepsilon_m = \varepsilon_0$?

Теоретик. Вероятность точного равенства, конечно, равна нулю, но так нельзя рассуждать, если в выражении стоит δ -функция. Представь ее в виде $\pi^{-1}s/[s^2 + (\varepsilon_0 - \varepsilon_m)^2]$, где s — очень малая величина. После этого легко убедиться, что результат не зависит от s .

Автор. Прекрасно, давай проинтерпретируем твой результат, считая, что все уровни имеют конечную ширину s .

В системе существует некоторое количество узлов, имеющих хотя бы одного ближайшего соседа с энергией, отличающейся от их собственной энергии на величину, не превышающую s . При $s \rightarrow 0$ число таких узлов стремится к нулю, однако они дают конечный вклад в (7.1), потому что при усреднении им приписывается очень большой вес, порядка $1/s$. Вот таким способом ты и получил выражение (7.3), которое, как мы теперь видим, не имеет никакого отношения к делу.

Теоретик. Я этого не вижу.

Автор. Представь себе все это в пространстве. Существуют пары, внутрь которых возможен переход между узлами. Расстояние между узлами одной пары в модели Андерсона равно постоянной решетки, а доля узлов, принадлежащих таким парам, порядка s/W . Таким образом, при малых значениях s пары изолированы друг от друга и никакие переходы между ними невозможны. Разве могут такие пары обеспечить расплывание волнового пакета на макроскопическое расстояние?

Теоретик. Пожалуй, ты прав. Получается, что вероятность перехода усреднять бессмысленно. А что же все-таки надо вычислять?

Автор. Андерсон представил вероятность перехода с узла (точнее — минимую часть собственной энергии функции Грина G_{00}) в виде $W = \lim_{s \rightarrow 0} s X(s)$. Во втором порядке теории возмущений

$$X(s) = \frac{2}{\hbar} \sum_m \frac{|I_m|^2}{s^2 + (\varepsilon_0 - \varepsilon_m)^2}. \quad (7.4)$$

Это, конечно, совпадает с тем, что ты написал, но только без усреднения по энергиям ε_m .

Теоретик. Как же работать с такой величиной? Ведь она зависит от того, какой узел мы взяли за исходный.

Автор. А ты думаешь, что на самом деле эта вероятность не зависит от узла? Да, $X(s)$ является случайной величиной, и Андерсон вычислил ее функцию распределения, используя выражение второго порядка (7.4).

Это сделать очень просто. Оказалось, что функция распределения $F(X)$ имеет вполне определенный предел при $s \rightarrow 0$. Наиболее вероятное значение X оказывается конечной величиной. Вследствие этого величина V равна нулю с вероятностью, равной единице.

Теоретик. Как же это связать с формулой (7.3)?

Автор. Дело в том, что при больших X функция $F(X)$ убывает всего лишь как $X^{-3/2}$, так что среднее значение X расходится. С этим и связан твой результат. Как видишь, он не имеет прямого отношения к вопросу о локализации.

Теоретик. Но, позовь, теперь получилось, что V всегда есть нуль и, следовательно, состояния всегда локализованы!

Автор. Да, именно так и получается во втором порядке теории возмущений. Однако Андерсон показал, что ряд теории возмущений для величины X расходится с вероятностью, равной единице при больших значениях I/W . Точка, где он начинает расходиться, и есть порог локализации. Андерсон показал, что такая точка действительно существует, но при оценке критического значения W_c/I столкнулся со значительными трудностями. Тем не менее он дал оценку для W_c/I . С точки зрения последующих расчетов на ЭВМ, эта оценка сильно завышена. Сравнительно просто эта оценка анализируется в работе Займана⁵².

Теоретик. При этом анализируется вероятность сходимости ряда для случайной величины. Как это делается?

Автор. Это сложная математическая задача, и я не собирался излагать ее в этом обзоре. Ты можешь составить собственное мнение с помощью статей Таулесса¹⁴ и Личчарделло и Иконому⁵³. Следует, кстати, заметить, что значения W_c/I , полученные в работе⁵³, очень хорошо согласуются с расчетами на ЭВМ.

Теоретик. Хочешь ли ты сказать, что усредненная одиночастичная функция Грина, которая содержит полную информацию о плотности состояний, вообще «ничего не знает» про переход Андерсона, т. е. точка перехода для нее ничем не выделена.

Автор. Нет, я не берусь отстаивать столь общее утверждение, но приведу некоторые хорошо известные аргументы в его пользу. Ты правильно заметил, что переходу Андерсона соответствует обращение в нуль минимой части собственной энергии. Но здесь речь должна идти только о неусредненной величине. Усредненная функция Грина всегда содержит минимую часть при всех энергиях. Чтобы увидеть это, возьми свободную функцию Грина $G_{ii} = (\epsilon - \epsilon_i + i\delta)^{-1}$ и проинтегрируй ее с весом $P(\epsilon_i)$. Более того, существует модель, для которой усредненная одиночастичная функция Грина точно известна. Это модель Ллойда⁵⁴. Она отличается от модели Андерсона всего лишь тем, что функция $P(\epsilon)$ выражается не формулой (3.2), а формулой

$$P(\epsilon) = \frac{\gamma}{\pi(\epsilon^2 + \gamma^2)}. \quad (7.5)$$

Все приведенные в гл. 3 качественные рассуждения в равной мере относятся и к модели Ллойда. Нужно только всюду (за исключением, может быть, только количественных оценок) заменить W на γ . Поэтому есть все основания полагать, что в модели Ллойда тоже происходит переход Андерсона при определенном соотношении между γ и I . Тем не менее найденная Ллойдом функция Грина, усредненная по всем реализациям энергии, имеет вид

$$G_{\mathbf{k}}(\epsilon) = (\epsilon - E(\mathbf{k}) + i\gamma)^{-1} \quad (\text{Im } \epsilon > 0), \quad (7.6)$$

где $E(\mathbf{k})$ выражается формулой (2.6).

Ничего проще, чем эта функция, нельзя себе представить. Ее собственно энергетическая часть не только не имеет особенностей, но и вообще не зависит от энергии. Это обстоятельство кажется мне сильным доводом в пользу того, что и в общем случае усредненная функция Грина, как мы выразились, «ничего не знает» о переходе Андерсона (см. также⁵⁵).

Теоретик. Известна ли какая-нибудь решенная модель, в которой виден переход?

Автор. Да, это модель Андерсона на решете Бете, представляющей собой бесконечно ветвящееся дерево. Метод, с помощью которого она решена, положен в основу приближенных вычислений для обычных решеток^{56, 57}.

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы изложили современные представления о локализации квантовых состояний в неупорядоченных системах. Для определенности речь шла об электронах, хотя эти представления в значительной мере распространяются и на колебательные уровни в решетках с замещенными атомами. Две важные концепции, сформулированные Андерсоном и Моттом, составляют основу этих представлений. Одна из них состоит в том, что существует резкая граница между локализованными и делокализованными состояниями, а вторая утверждает, что при прохождении уровня Ферми через эту границу электропроводность обращается в нуль скачком. Вероятно, ни одна из этих концепций не является строго обоснованной. Однако, как мы видели, первая из них настолько прочно вошла в современную физику, что представляется немыслимым объяснить огромный экспериментальный материал, касающийся аморфных и легированных кристаллических полупроводников, не основываясь на этой концепции.

Было бы преувеличением сказать то же самое относительно концепции минимальной металлической проводимости, хотя появляющиеся в последнее время экспериментальные данные по МДП-структурам все более свидетельствуют в ее пользу^{33, 58, 59}.

Мы оставили в стороне большое количество весьма интересных работ, в которых разрабатываются аналитические методы для вычисления порогов локализации (см. библиографию в^{53, 54}), однако основные идеи этих работ изложены в гл. 7.

Нам представляется, что задача о переходе Андерсона близка к задаче о фазовом переходе второго рода и ее решение должно строиться в духе представлений о подобии. Вероятно, этому должна предшествовать феноменологическая теория, вводящая параметр порядка и критические индексы, подобная той, которая создана в теории протекания. По-видимому, индексом радиуса корреляции является индекс s в (6.6). Однако, насколько нам известно, работ такого рода до сих пор не было.

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе
АН СССР, Ленинград

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- Anderson P. W.—Phys. Rev., 1958, v. 109, p. 1492.
- Lieb E., Wu F. Y.—Phys. Rev. Lett., 1968, v. 20, p. 1445.
- Mott N. F. Metal-Insulator Transitions. — London: Taylor and Francis, 1974.
- Хомский Д. И. —ФММ, 1970, т. 29, с. 31.
- Bell R. J., Dean P.—Disc. Faraday Soc., 1970, v. 50, p. 55.
- Herbert D. C., Jones R.—J. Phys. Ser. C, 1971, v. 4, p. 1145.
- Mott N. F., Twose W. D.—Adv. Phys., 1961, v. 10, p. 107.
- Borland R. E.—Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1963, v. 274, p. 529.
- Halperin B. I.—Adv. Chem. Phys., 1967, v. 13, p. 123.
- Bush R. L.—Phys. Rev. Ser. B, 1972, v. 6, p. 1182.

11. Березинский В.Л.—ЖЭТФ, 1973, т. 65, с. 4251.
12. Ishii K.—Progr. Theor. Phys., Suppl., 1973, v. 53, p. 77.
13. Rappatiantafillou C., Economou E. N., Eggarter T. P.—Phys. Rev. Ser. B, 1976, v. 13, p. 910.
14. Thouless D. J.—Phys. Rept., 1974, v. C13, p. 94.
15. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.—УФН, 1975, т. 117, с. 401.
16. Kirkpatrick S.—Phys. Rev. Lett., 1976, v. 36, p. 69.
17. Edwards J. T., Thouless D. J.—J. Phys. Ser. C, 1972, v. 5, p. 807.
18. Licciardello D. C., Thouless D. J.—Ibid., 1975, v. 8, p. 4157.
19. Weaire D., Srivastava V.—Comm. Phys., 1977, v. 2, p. 73; In: Proc. of 7th Intern. Conference on Amorphous Liquid Semiconductors/Ed. W. Spear.—Edinburgh: 1977.—P. 286.
20. Лифшиц И. М.—ЖЭТФ, 1963, т. 44, с. 1723.
21. Лифшиц И. М.—УФН, 1964, т. 83, с. 617.
22. Косевич А. М.—Основы механики кристаллической решетки.—М.: «Наука», 1972.—С. 141.
23. Kikuchi M.—J. Phys. Soc. Japan, 1974, v. 37, p. 904.
24. Mott N., Davis E. Электронные процессы в некристаллических веществах.—М.: Мир, 1974.—С. 47.
25. Бонч-Бруевич В. Л.—В кн. Физика твердого тела.—М.: ВИНИТИ, 1965.
26. Эфрос А. Л.—УФН, 1973, т. 111, с. 451.
27. Alexander M. N., Holcomb D. F.—Rev. Mod. Phys., 1968, v. 40, p. 815.
28. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.—ЖЭТФ, 1971, т. 61, с. 816.
29. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.—ЖЭТФ, 1972, т. 62, с. 1156.
30. Ziman J. M.—J. Phys. Ser. C, 1968, v. 1, p. 1532.
31. Mott N. F.—Electronics and Power, 1973, v. 19, p. 321.
32. Stern F.—Phys. Rev. Ser. B, 1974, v. 9, p. 2762.
33. Mott N. F., Pepper M., Pollitt S., Wallis R. H., Adkins C. J.—Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1975, v. 345, p. 169.
34. Mott N. F.—Adv. Phys., 1967, v. 16, p. 49.
35. Mott N. F.—Phil. Mag., 1972, v. 26, p. 505.
36. Mott N. F.—Ibid., 1974, v. 29, p. 613.
37. Cohen M. H.—J. Non-Cryst. Sol., 1970, v. 4, p. 391.
38. Cohen M. H., Jortner J.—Phys. Rev. Lett., 1973, v. 30, p. 699.
39. Mott N. F.—Ibid., v. 31, p. 466.
40. Ioffe A. F., Regel A. R.—Progr. Semicond., 1960, v. 4, p. 237.
41. Licciardello D. C., Thouless D. J.—Phys. Rev. Lett., 1975, v. 35, p. 1475.
42. Efros A. L., Shklovskii B. I.—J. Phys. Ser. C, 1975, v. 8, p. L49.
43. Efros A. L.—Ibid., 1976, v. 9, p. 2021.
44. Anderson P. W. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1972, v. 69, p. 1097.
45. Abram R. A., Edwards S. F.—J. Phys. Ser. C, 1972, v. 5, p. 1183.
46. Freed K. F.—Ibid., 1971, v. 4, p. L331.
47. Freed K. F.—Phys. Rev. Ser. B, 1971, v. 5, p. 4802.
48. Садовский М. В.—ЖЭТФ, 1976, т. 70, с. 1936.
49. De Gennes P. G.—Phys. Lett. Ser. A, 1972, v. 38, p. 339.
50. Abram R. A.—J. Phys. Ser. C, 1973, v. 6, p. L379.
51. Last B. J., Thouless D. J.—Ibid., 1974, v. 7, p. 699.
52. Ziman J. M.—Ibid., 1969, v. 2, p. 1230.
53. Licciardello D. C., Economou E. N.—Phys. Rev. Ser. B, 1975, v. 11, p. 3697.
54. Lloyd P.—J. Phys. Ser. C, 1969, v. 2, p. 1717.
55. Иванов М. А., Погорелов Ю. Г.—ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 2198.
56. Abou-Chacra R., Anderson P. W., Thouless D. J.—J. Phys. Ser. C, 1973, v. 6, p. 1734.
57. Abou-Chacra R., Thouless D. J.—Ibid., 1974, v. 7, p. 65.
58. Pepper M.—Ibid., 1977, v. 10, p. L173; Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1977, v. 353, p. 225.
59. Neron J., Filion A., Girard P.—J. Phys. Ser. C, 1976, v. 7, p. L263.
60. Licciardello D. C., Thouless D. J.—Ibid., 1978, v. 11, p. 925.—Подвергается сомнению часть выводов, сделанных авторами в работе ¹⁸.