

ПЕРЕХОД ПОЛУПРОВОДНИК-МЕТАЛЛ В МОДЕЛИ
"ЖИДКОГО ПОЛУПРОВОДНИКА"

М. В. Садовский

УДК 537.311.33

В работе предлагается обобщение рассмотренной ранее модели неупорядоченных систем типа "жидких полупроводников", позволяющее описать плавный переход этих систем в металлическое состояние. Показано, что эта модель может служить микроскопической основой описания кинетики в таких системах на основе теории "протекания" (percolation).

Экспериментальные исследования "жидких полупроводников", т.е. расплавов, частично сохраняющих при плавлении полупроводниковые свойства соответствующих кристаллов /1-2/, показали, что при нагревании в них происходит постепенный переход в металлическое состояние /3,4/. В настоящей работе предлагается обобщение рассмотренной ранее модели "жидких полупроводников" /5/, описывающее такой переход.

Основной результат работы /5/ состоит в возможности введения в неупорядоченной системе типа "жидкого полупроводника" своего рода "когерентного" механизма рассеяния брэгговского типа с флуктуирующей амплитудой w , так что система оказывается эквивалентной ансамблю идеальных полупроводников с флуктуирующей щелью в спектре электронов. При этом одночастичная функция Грина, усредненная по всевозможным конфигурациям ионной подсистемы, представляется в виде

$$G(i\varepsilon_n p) = \int_{-\infty}^{\infty} dw \mathcal{P}\{w\} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - w^2}, \quad (I)$$

где $\xi_p = v_F(|\vec{p}| - p_F)$; $\varepsilon_n = (2n + 1)\pi T$ (v_F, p_F - скорость и импульс ферми, T - температура),

$$\mathcal{P}\{w\} = \frac{|w|}{A^2} \exp \left\{ -\frac{w^2}{A^2} \right\} \quad (2)$$

- так наз. распределение Рэлея, хорошо известное в статистической радиофизике /6/ и описывающее здесь распределение щелей в спектре.

$$\Lambda^2 = \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle \vec{p} + \vec{q} | \vec{V} | \vec{p} \rangle|^2 s(\vec{q}), \quad (3)$$

$s(\vec{q})$ - статический структурный фактор жидкости, имеющий острый пик при $|\vec{q}| = K$; $K \sim 2p_F$. $\langle \vec{p} + \vec{q} | \vec{V} | \vec{p} \rangle$ - матричный элемент ионного псевдопотенциала, Ω_0 - объем, приходящийся на один атом. Как показано в /5/, рассматриваемая модель справедлива, если выполнены условия:

$$v_F \gamma \ll |\xi_p|, \quad 2\pi\tau, \quad (4)$$

где γ - ширина главного пика структурного фактора, и если (для трехмерной системы) имеется сильная нелокальность псевдопотенциала, так что доминирует рассеяние "назад" в конус

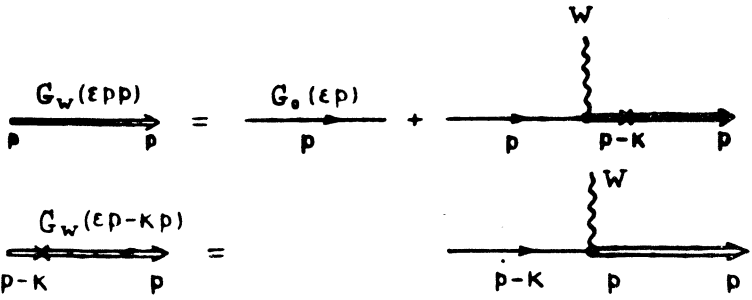
$$\delta\theta^2 \ll \left| \frac{p - p_F}{p_F} \right|, \quad \frac{2\pi\tau}{\epsilon_F}, \quad (5)$$

где ϵ_F - энергия Ферми. Условия (4) и (5) ограничивают рассматриваемую область энергии не слишком близких к уровню Ферми. Легко видеть, что (1) получается при решении системы уравнений рис. 1 для функций Грина идеального полупроводника (типа экситонного изолятора) с последующим усреднением по флуктуациям когерентного поля с распределением (2).

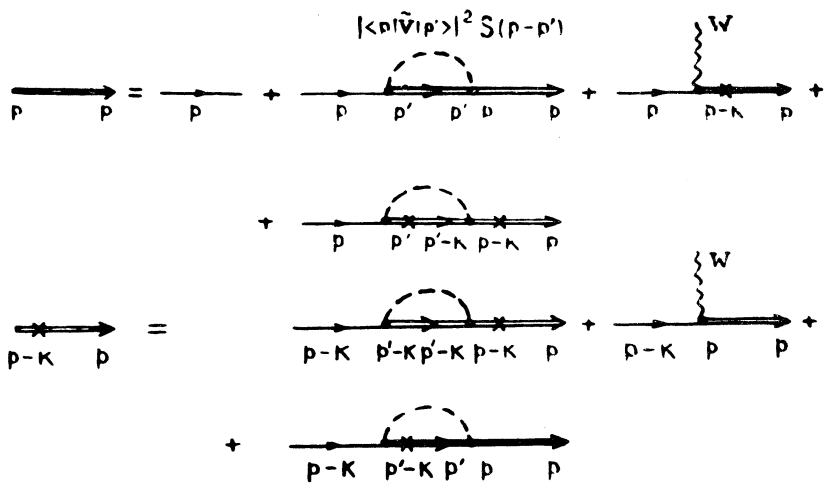
В работе /5/ было проведено суммирование всех существенных диаграмм, в которых реальное взаимодействие в жидкости $|\langle \vec{p} + \vec{q} | \vec{V} | \vec{p} \rangle|^2 s(\vec{q})$ заменялось модельным $(4\pi^2/k^2 \Omega_0) \Lambda^2 \delta(q - K) \delta(\cos\theta + 1)$, что оправдано при выполнении условий (4) и (5). Рассмотрим теперь влияние неучтенной части реального взаимодействия, которая имеет вид:

$$\begin{aligned} |\langle \vec{p} + \vec{q} | \vec{V} | \vec{p} \rangle|^2 s(\vec{q}) &= \\ &= |\langle \vec{p} + \vec{q} | \vec{V} | \vec{p} \rangle|^2 s(\vec{q}) - \frac{4\pi^2}{k^2 \Omega_0} \Lambda^2 \delta(q - K) \delta(\cos\theta + 1). \end{aligned} \quad (6)$$

Тогда в простейшем самосогласованном приближении по (6) система уравнений Рис. 1 переходит в систему Рис. 2, решение которой имеет вид:



Р и с. 1. Графическое представление системы уравнений для функций Грина идеального полупроводника



Р и с. 2. Система уравнений для полупроводника при наличии некогерентного механизма рассеяния

$$G_W(i\epsilon_n \bar{p}\bar{p}) = \frac{i\tilde{\epsilon}_n(p) + \xi_p}{(i\tilde{\epsilon}_n(p))^2 - \xi_p^2 - \tilde{W}_n^2(p)}, \quad (7a)$$

$$G_W(i\epsilon_n \bar{p} - \bar{K}p) = \frac{\tilde{W}_n(p)}{(i\tilde{\epsilon}_n(p))^2 - \xi_p^2 - \tilde{W}_n^2(p)}, \quad (7b)$$

где

$$i\tilde{\epsilon}_n(p) = i\epsilon_n - \sum (i\epsilon_{n,pp}), \quad (8)$$

$$\tilde{W}_n(p) = W + \sum (i\epsilon_{n,p} - Kp),$$

$$\begin{aligned} \sum (i\epsilon_{n,pp}) &= \\ &= \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle \bar{p} + \bar{q} | \tilde{V} | \bar{p} \rangle|^2 S(\bar{q}) G_W(i\epsilon_n \bar{p} + \bar{q} \bar{p} + \bar{q}) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \sum (i\epsilon_{n,p} - Kp) &= \\ &= \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle \bar{p} + \bar{q} | \tilde{V} | \bar{p} \rangle|^2 S(\bar{q}) G_W(i\epsilon_n \bar{p} - \bar{K} + \bar{q} \bar{p} + \bar{q}) \end{aligned}$$

Когерентное поле по-прежнему распределено согласно (2); так что (7) следует усреднить с этим распределением, в результате чего, в частности, обращается в нуль средняя аномальная функция Грина (7б), что соответствует отсутствию дальнего порядка.

Угловая зависимость матричного элемента псевдопотенциала обусловлена его нелокальностью. Считая, что весь эффект нелокальности сводится к созданию острого пика псевдопотенциала, соответствующего рассеянию "назад", и, таким образом, уже учтен в модельном взаимодействии, мы можем положить $\langle \bar{p} + \bar{q} | \tilde{V} | \bar{p} \rangle$ равным некоторому локальному псевдопотенциалу (например, в приближении на поверхности Ферми /7/). Тогда из (9) получим:

$$\sum (i\epsilon_{n,pp}) \approx -\frac{\Gamma}{2} \frac{i\epsilon_n}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_n^2 + \tilde{W}_n^2}}, \quad \sum (i\epsilon_{n,p} - Kp) \approx -\frac{\Gamma}{2} \frac{\tilde{W}_n}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_n^2 + \tilde{W}_n^2}}. \quad (10)$$

Здесь

$$\Gamma = \Omega_0 \frac{mp_F}{2\pi\hbar} \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle \tilde{p} | \tilde{V} | \tilde{p}' \rangle|^2 S(\tilde{p} - \tilde{p}') \Big|_{|\tilde{p}|=|\tilde{p}'|=p_F} \quad (\text{II})$$

(m - масса свободного электрона), что имеет смысл обратного времени рассеяния электрона с поверхности Ферми на локальном псевдопотенциале $\langle p | \tilde{V} | p' \rangle$. Тогда

$$\tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + \frac{\Gamma}{2} \frac{u_n}{\sqrt{u_n^2 + 1}}, \quad \tilde{w}_n = w - \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}}, \quad (\text{I2})$$

где $u_n = \tilde{\varepsilon}_n / \tilde{w}_n$ определяется уравнением

$$\frac{\varepsilon_n}{w} = u_n \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{w} \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \right\} \quad (\text{I3})$$

как функция ε_n/w и Γ/w . Таким образом, наше рассмотрение системы уравнений Рис. 2 аналогично задаче о влиянии магнитных примесей на сверхпроводимость /8/ или обычных примесей на экситонный изолятор /9/. Из (8) получаем обычным образом плотность электронных состояний при фиксированном w (N_0 - плотность состояний свободных электронов)

$$\frac{N_w(\varepsilon)}{N_0} = \text{Im} \frac{u}{\sqrt{1 - u^2}}, \quad (\text{I4})$$

где u определяется аналитическим продолжением (I3)

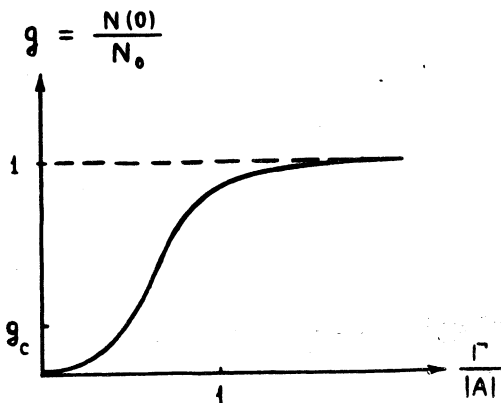
$$\frac{\varepsilon}{w} = u \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{w} \frac{1}{\sqrt{1 - u^2}} \right\}. \quad (\text{I5})$$

Тогда плотность состояний в "жидком полупроводнике" есть

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \frac{1}{A^2} \int_{-\infty}^{\infty} dw |w| \exp(-w^2/A^2) \text{Im} \frac{u}{\sqrt{1 - u^2}}. \quad (\text{I6})$$

При $\Gamma/|A| \rightarrow 0$ (I6) переходит в результат работы /5/. При конечных $\Gamma/|A|$ (I6) описывает плотность состояний с псевдощелью (шириной $\sim 2|A|$), причем в отличие от /5/ плотность состояний отлична от нуля и на уровне Ферми (в центре псевдощели). Имеем

$$\varepsilon = \frac{N(0)}{N_0} = \frac{|\Lambda|}{\Gamma} \int_0^{\Gamma^2/\Lambda^2} dx e^{-x} \sqrt{\frac{\Gamma^2}{\Lambda^2} - x} = \frac{2|\Lambda|}{\Gamma} \exp\left\{-\frac{\Gamma^2}{\Lambda^2}\right\} \frac{d}{d\alpha} \operatorname{Erfi} \sqrt{\alpha} \left. \frac{\Gamma}{|\Lambda|} \right|_{\alpha=1} \quad (17)$$



Р и с. 3. Плотность состояний на уровне Ферми. Заполнение псевдощели при росте Γ

где $\operatorname{Erfi} x = \int_0^x dx e^{x^2}$. При $\Gamma/|\Lambda| \ll 1$ имеем

$$\varepsilon \approx \frac{2}{3} \left(\frac{\Gamma}{\Lambda}\right)^2. \quad (18)$$

При $\Gamma/|\Lambda| \gg 1$ $\varepsilon \rightarrow 1$, т.е. при $\Gamma \sim |\Lambda|$ происходит заполнение псевдощели и система переходит в "металлическое" состояние /3,4/. Качественно поведение ε представлено на Рис. 3. Поскольку Γ является растущей функцией температуры (из-за соответствующей температурной зависимости структурного фактора), переход полупроводник-металл происходит с ростом температуры. Заметим, что (14) описывает плотность состояний со щелью $\varepsilon_g = |\omega| \left| 1 - (\Gamma/\omega)^{2/3} \right|^{3/2}$ при $\Gamma < |\omega|$ и бесщелевой случай при $\Gamma \geq |\omega|$ /8,9/. Поэтому (16) соответствует ансамблю, частично состоящему из "металлических" областей с нулевой щелью, причем их доля в ансамбле конечна и пропорциональна ε . Качественно ε имеет смысл части объема, занятой "металлическими" областями, тогда как $1 - \varepsilon$ - часть объема,

занятая "полупроводниковыми" областями. Для описания кинетики в рассматриваемой модели мы можем использовать идеи теории "протекания" (percolation) /10/. При $g < g_c$, где g_c - некоторое критическое значение, объем жидкости состоит в основном из полупроводниковых областей и изолированных металлических "островков" - электроны локализованы из-за "брегговского" рассеяния. При $g = g_c$ появляется первый непрерывный путь через весь образец, проходящий целиком в металлической области. При $g > g_c$ весь объем заполняется такими металлическими областями, и при $g \rightarrow 1$ система становится металлом. При $g > g_c$ проводимость определяется, главным образом, металлическими областями - электроны делокализованы. Критическое g_c по различным оценкам /10/ заключено в пределах $0,15 \leq g_c \leq 0,5$. Наиболее типично $g_c \approx 0,2$. Тогда из (18) следует, что в нашей модели делокализация электронов и переход к металлической проводимости происходит при $\Gamma/|A| \approx 0,5$.

В заключение автор выражает глубокую благодарность Л. В. Келдышу за обсуждение всего круга вопросов, рассмотренных в данной работе.

Поступила в редакцию
10 апреля 1974 г.

Л и т е р а т у р а

1. В. А. Алексеев, А. А. Андреев, В. Я. Прохоренко. УФН, 106, 393 (1972).
2. R. S. Allgaier. Phys. Rev., 185, 227 (1968); Phys. Rev., B2, 2257 (1970).
3. А. А. Андреев, В. А. Алексеев, А. Л. Манукян, Л. Н. Шумилова. ФТТ, 15, 382 (1973).
4. W. Warren. Phys. Rev., B3, 3708 (1971); Phys. Rev., B6, 2522 (1972).
5. М. В. Садовский. ЖЭТФ, 66, 1720 (1974).
6. С. М. Рытов. Статистическая радиофизика. "Наука", 1966 г.
7. В. Хейне, М. Козн, Д. Уэйр. Теория псевдопотенциала. "Мир", 1973 г.
8. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков. ЖЭТФ, 39, 1781 (1960).
9. J. Zittars. Phys. Rev., 164, 757 (1967).
10. V. Shante, S. Kirkpatrick. Adv. Phys., 20, 325 (1971).
S. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys., 45, 574 (1973).