

Министерство общего и профессионального образования
Российской Федерации
Московский физико-технический институт
(Государственный Университет)

Учебное пособие

Введение в теорию неупорядоченных систем.

Москва, 2017 г.

Содержание

1	Виды и проявления беспорядка в конденсированных средах	5
2	Невзаимодействующие электроны: модель Андерсона	6
3	Плотность состояний в модели Андерсона	8
3.1	Сильный беспорядок	8
3.2	Слабый беспорядок	10
3.3	Задачи	11
3.3.1	Роль резонансных пар	11
3.3.2	Рассеяние в модели Андерсона при слабом беспорядке	11
4	Плотность состояний в модели Ллойда: точное решение.	12
4.1	Задачи	14
4.1.1	Плотность состояний в одномерной модели Ллойда .	14
5	Хвосты плотности состояний и их роль в оптике	14
6	Хвосты плотности состояний для случая гауссова случайного потенциала	16
6.1	Метод оптимальной флуктуации	17
6.2	Случай "пространственного белого шума".	19
6.3	Случай "плавного потенциала".	20
6.4	Итоги	21
6.5	Задачи	21
6.5.1	Одномерный случай	21
6.5.2	Поправки в случае плавного потенциала	21
7	Предэкспоненциальный множитель в вероятности оптимальной флуктуации	22
7.1	Нулевые моды	23
7.2	Ненулевые моды	25
8	Плотность состояний вблизи границы спектра в модели Андерсона с ограниченными флуктуациями	26
8.1	Применение метода оптимальной флуктуации: качественные оценки	27
8.2	Формулировка и решение вариационной задачи	28
8.2.1	Обоснование применимости теории возмущений . . .	29

8.2.2	Нулевое приближение: главная экспоненциальная зависимость	30
8.2.3	Первое приближение: Определение подлогарифмического множителя	31
8.3	Задачи	32
8.3.1	Процедура огрубления	32
8.3.2	Подлогарифмический множитель в одномерном случае	33
9	Модель Лифшица	33
9.1	Случай высокой плотности примесей	33
9.2	Задачи	34
9.2.1	Длина свободного пробега электронов при высокой плотности примесей	34
9.3	Случай низкой плотности примесей	34
9.3.1	Классификация состояний	34
9.3.2	Ближний хвост плотности состояний: $1 \ll \ln(t_0/ E) \ll \bar{r}/a$	36
9.3.3	Дальний хвост плотности состояний: $E \gg t_0$	37
9.3.4	Большие отрицательные энергии $E < -t_0$	38
9.3.5	Область провала: $\ln(t_0/ E) \gg \bar{r}/a$	39
9.3.6	Очень малые энергии	40
9.4	Задачи	41
9.4.1	Ограниченность спектра в модели Лифшица	41
10	Локализационный переход	41
10.1	Локализованные и делокализованные волновые функции: простейшие примеры и их обобщение.	42
10.2	Переход Андерсона и длина локализации.	43
10.3	Как отличить локализованную функцию от делокализованной в общем случае?	45
10.4	Фазовая диаграмма	46
10.4.1	Качественное описание перехода Андерсона.	47
10.5	Мультифрактальность волновых функций вблизи критической точки (локализационного перехода).	48
10.6	Задачи	51
10.6.1	Иерархическая структура мультифрактальных волновых функций	51
11	Ближе к реальности: легированный полупроводник	51
11.1	Доноры и акцепторы	51

11.2	Статистика электронных уровней слабо легированного полупроводника	54
11.3	Дальнодействующие случайные поля и разброс донорных уровней	58
11.4	Задачи	59
11.4.1	Заряженные донорно-акцепторные комплексы	59
11.4.2	Расходимость потенциала некоррелированных примесей	60
11.4.3	Вклад донорно-акцепторных пар в случайный потенциал	60
11.4.4	Линейное экранирование в слабо легированном слабо компенсированном полупроводнике	60
12	Обзор механизмов проводимости слабо легированного полупроводника в разных температурных интервалах	60
12.1	Задачи	63
12.1.1	Термодинамика легированного полупроводника . . .	63
13	Прыжковая проводимость	63
13.1	Сетка сопротивлений Миллера и Абрахамса	65
13.2	Прыжковая проводимость и теория перколяции	68
13.3	Задачи	70
13.3.1	Связь интеграла перекрытия с подбарьерным действием	70
13.3.2	Подбарьерное действие в анизотропном случае . . .	70
14	Прыжковая проводимость по ближайшим соседям	70
14.1	Зависимость от концентрации доноров	71
14.2	Зависимость от магнитного поля	73
14.3	Зависимость от температуры	78
14.4	Задачи	80
14.4.1	Корреляционная длина для сетки Миллера-Абрахамса	80
14.4.2	Флуктуации сопротивления между двумя конечными контактами	80
14.4.3	Подбарьерное действие в слабом поле	80
14.4.4	Подбарьерное действие в сильном поле	80
14.4.5	Задача об эллипсоидах	81
14.4.6	Анизотропия магнитосопротивления	81
14.4.7	Магнитосопротивление в двумерном случае	81

15 Прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка.	
Закон Мотта	81
15.1 Качественный вывод закона Мотта	81
15.2 Перколяционный вывод	83
15.3 Задачи	84
15.3.1 Магнитосопротивление в области VRH	84
16 Влияние подбарьерного рассеяния на прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка.	85
16.1 Слабые флуктуации	86
16.2 Сильные флуктуации	87
16.3 Задачи	88
16.3.1 Подбарьерное рассеяние в одномерном случае.	88

1 Виды и проявления беспорядка в конденсированных средах

Идеально упорядоченной системой является кристалл, представляющий собой регулярную кристаллическую решетку, в узлах которой расположены атомы. Эти атомы, в частности, создают периодический потенциал для электронов, волновые функции которых имеют блоховский вид, а спектр имеет зонную структуру. Такой идеальный кристалл, однако, является абстракцией, довольно сильно упрощающей реальную ситуацию.

Какие черты реальности, не учтенные вышеописанной картиной, наиболее важны и неустранимы?

1. Атомы не прибиты гвоздями к узлам кристаллической решетки: эти узлы являются всего лишь положениями равновесия: минимумами потенциальной энергии взаимодействия атомов между собой. Атомы неизбежно отклоняются от этих положений равновесия, совершая колебания около них. Если бы мы могли сделать мгновенную фотографию положений атомов, мы бы увидели, что в каждый момент времени атомы расположены в точках, нерегулярным образом отклоняющихся от положений равновесия. В разные моменты времени картина расположения атомов разная, поэтому этот беспорядок – динамический. Если усреднить плотность атомов $\rho(\mathbf{r})$ по времени, то мы получим периодическую картину с максимумами, расположенными в узлах кристаллической решетки. Наличие такой периодичности часто называют “дальним порядком”, его мерой может служить величина коэффициента при дельта-функционном вкладе в Фурье-разложение плотности: $\rho_{\mathbf{k}} = A_0\delta(\mathbf{k}) + \sum_n A_n\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_n)$, где $\mathbf{k}_n$ – волновые векторы периодической структуры. С ростом температуры амплитуды отклонений увеличиваются, A_n уменьшаются, и в какой-то момент обращаются в ноль: дальний порядок в системе исчезает; кристалл плавится и превращается в однородную жидкость.

Из-за квантового характера движения атомов амплитуда их колебаний вблизи положения равновесия не обращается в нуль даже и при $T = 0$. Так как массы атомов велики, нулевые колебания обычно малы. Однако в случае аномально мягкого кристалла

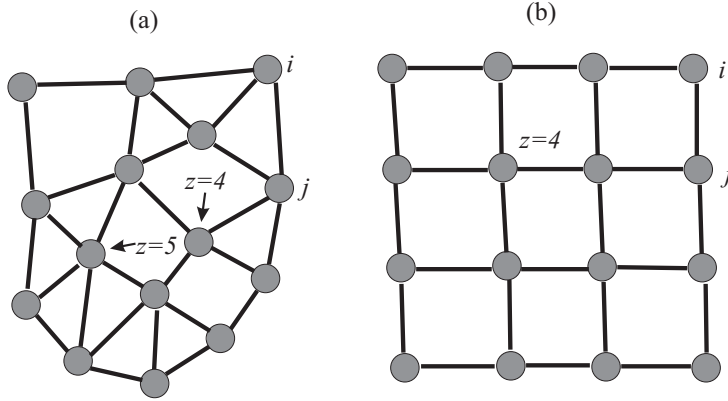


Рис. 1: (a): Случайная решетка: в системе имеется топологический беспорядок (в частности, случайны координационные числа z_i) (b): Топологически идеальная решетка.

2 Невзаимодействующие электроны: модель Андерсона

Самый общий вид гамильтониана, описывающего движение невзаимодействующих электронов в неупорядоченной решетке, дается формулой

$$\hat{H} = \sum_{i\sigma i'\sigma'} H_{i\sigma i'\sigma'} a_{i\sigma}^+ a_{i'\sigma'}, \quad (1)$$

где индексы i, j нумеруют узлы решетки, оператор a_i^+ рождает электрон со спином σ на узле i а матричные элементы H_{ij} удовлетворяют условию эрмитовости $H_{i\sigma i'\sigma'} = H_{i'\sigma' i\sigma}^*$. различают четыре типа беспорядка, присутствующие в гамильтониане (1):

1. Топологический беспорядок, описывающий нерегулярности в самой геометрии решетки (см. рис.1a).
2. Диагональный беспорядок, описывающий случайный характер энергии $H_{i\sigma i\sigma}$, которую приобретает частица, попадая на узел i .
3. Недиагональный беспорядок, описывающий случайность недиагональных по узлам (но диагональных по спинам) матричных элементов $H_{i\sigma i'\sigma}$, описывающих перескоки с узла i на узел j ($i \neq j$).
4. Магнитный беспорядок: случайность матричных элементов, недиагональных по $\sigma\sigma'$.

Модель Андерсона учитывает только один из этих четырех типов беспорядка – диагональный

$$\hat{H} = t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i^\dagger a_j) + \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i, \quad (2)$$

где $\langle ij \rangle$ обозначает пару ближайших соседей, t – матричный элемент перескока электрона между ближайшими соседями, а решетка предполагается идеальной (см. рис.1b). Спиновые индексы, по которым гамильтониан диагонален, для краткости опущены.

Гамильтониан (2) характеризуется набором N (N – число узлов в решетке) одноузельных энергий ϵ_i – *независимых* случайных параметров, каждый из которых описывается функцией распределения $P(\epsilon)$ (одинаковой для всех узлов). В исходной работе Андерсона функция $P(\epsilon)$ была выбрана в виде

$$P_A(\epsilon) = \frac{1}{W} \theta(W/2 - \epsilon), \quad (3)$$

но рассматриваются также и вариант с гауссовым распределением

$$P_G = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} \exp\{-\epsilon^2/2\Delta^2\}, \quad (4)$$

и вариант с лоренцевым распределением

$$P_{Ll} = \Gamma/\pi(\epsilon^2 + \Gamma^2), \quad (5)$$

(последний называется моделью Ллойда по имени человека, впервые исследовавшего эту модель).

Модель Андерсона описывает одночастичную задачу, поэтому ее решение, в принципе, сводится к диагонализации матрицы H_{ij} – определению ее собственных значений $E_\alpha(\{\epsilon_i\})$ и собственных векторов $\psi_\alpha(i|\{\epsilon_i\})$, зависящих от набора случайных параметров $\{\epsilon_i\}$. После этого любая интересующая нас физическая величина $A(\{\epsilon_i\})$ может быть выражена в терминах E_α и $\psi_\alpha(i)$, а ее функция распределения может быть найдена, как

$$\mathcal{P}(A) = \int \prod_i P(\epsilon_i) d\epsilon_i \delta[A - A(\{\epsilon_i\})]. \quad (6)$$

При произвольном выборе $\{\epsilon_i\}$ такую диагонализацию, однако, невозможно произвести аналитически. Поэтому при вычислениях приходится использовать приближенные методы.

3 Плотность состояний в модели Андерсона

Мы начнем с обсуждения плотности состояний

$$\nu(E, \{\epsilon_i\}) \equiv \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\alpha} \delta[E - E_{\alpha}(\{\epsilon_i\})], \quad (7)$$

где $\mathcal{V} = Nv$ – объем системы, а v – объем элементарной ячейки. Плотность состояний можно выразить через запаздывающую (или через опережающую) функцию Грина системы. Действительно, пользуясь определением

$$G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r})\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} \pm i0}, \quad (8)$$

получим

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \operatorname{Im} \left\{ G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \right\} &= \sum_{\alpha} \operatorname{Im} \left\{ \frac{1}{E - E_{\alpha} \pm i0} \right\} \int d\mathbf{r} |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 = \\ &= \mp \pi \sum_{\alpha} \delta(E - E_{\alpha}), \end{aligned} \quad (9)$$

откуда следует

$$\nu(E, \{\epsilon_i\}) \equiv \mp \frac{1}{\pi \mathcal{V}} \int d\mathbf{r} \operatorname{Im} \left\{ G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r} | \{\epsilon_i\}) \right\}, \quad (10)$$

Для некоторых задач бывает нужна локальная плотность состояний:

$$\nu(\mathbf{r}, E, \{\epsilon_i\}) \equiv \sum_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{r})|^2 \delta[E - E_{\alpha}(\{\epsilon_i\})], \quad (11)$$

$$\nu(E, \{\epsilon_i\}) = \int \frac{d\mathbf{r}}{\mathcal{V}} \nu(\mathbf{r}, E, \{\epsilon_i\}). \quad (12)$$

Мы будем в первую очередь интересоваться средней плотностью состояний

$$\bar{\nu}(E) = \int \prod_i P(\epsilon_i) d\epsilon_i \nu(E, \{\epsilon_i\}). \quad (13)$$

3.1 Сильный беспорядок

Мы начнем обсуждение со случая сильного беспорядка $W \gg t$. При этом условии подавляющее большинство электронных состояний является одноузельными: каждое из них сосредоточено на одном каком-нибудь узле i_0 :

$$\psi_{i_0}(i) \approx \delta_{ii_0}, \quad E_{i_0} \approx \epsilon_{i_0}. \quad (14)$$

Амплитуды типичных волновых функций экспоненциально спадают при удалении от центрального узла: $\psi_{i_0}(i) \propto (t/W)^{|i-i_0|}$. В низшем порядке по t/W

$$\psi_{i_0}(i) \approx \delta_{ii_0} + \sum_{j:\langle i_0j \rangle} [t/(\epsilon_{i_0} - \epsilon_j)] \delta_{ij}, \quad E_{i_0} \approx \epsilon_{i_0} + \sum_{j:\langle i_0j \rangle} [t^2/(\epsilon_{i_0} - \epsilon_j)]. \quad (15)$$

Формулы (14) справедливы, если энергии всех ближайших соседних узлов не слишком близки к энергии центрального: $|\epsilon_{i_0} - \epsilon_j| \gg t$. Ясно, что это условие выполняется почти для всех i_0 . Имеется, однако малая доля ($\sim t/W$) резонансных пар $\langle ij \rangle$, для которых $|\epsilon_i - \epsilon_j| \lesssim t$, для таких пар волновая функция примерно поровну распределена между ее компонентами. Резонансных троек еще меньше. Из формулы (14), в частности, следует, что

$$\bar{\nu}(E) \approx \frac{1}{v} \sum_{i_0} \int \prod_i P(\epsilon_i) d\epsilon_i \delta(E - \epsilon_{i_0}) = \frac{P(E)}{v}. \quad (16)$$

при $W \gg t$.

Вычислим малую поправку к этой формуле, обусловленную возмущением, причем сначала будем пренебрегать наличием резонансных пар. Тогда

$$\begin{aligned} \bar{\nu}(E) &\approx \frac{1}{v} \sum_{i_0} \int \prod_i P(\epsilon_i) d\epsilon_i \delta \left(E - \epsilon_{i_0} - \sum_{j:\langle i_0j \rangle} [t^2/(\epsilon_{i_0} - \epsilon_j)] \right) \approx \\ &\approx \frac{P(E)}{v} - \frac{zt^2}{v} \int \frac{P(\epsilon_i)P(\epsilon_j)}{\epsilon_i - \epsilon_j} \delta'(E - \epsilon_i) d\epsilon_i d\epsilon_j = \\ &= \frac{P(E)}{v} - \frac{zt^2}{v} \frac{\partial}{\partial E} \left\{ P(E) \text{ v.p.} \int \frac{P(\epsilon) d\epsilon}{E - \epsilon} \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

где символ v.p. $\int$ отмечает главное значение несобственного интеграла. В случае распределения Андерсона (3) формула (17) дает

$$\delta\nu(E) \approx -\frac{z|t|^2}{vW[(W/2)^2 - E^2]}. \quad (18)$$

этот результат справедлив только при $W/2 - |E| \gg |t|$, в противном случае нельзя пользоваться разложением (??) и нужно учитывать наличие резонансных пар. Этому посвящена задача 3.3.1.

3.2 Слабый беспорядок

В случае слабого беспорядка, наоборот, в главном приближении можно пренебречь величинами ϵ_i и характеризовать состояния волновым вектором $\mathbf{k}$ и номером зоны μ :

$$\psi_{\mu,\mathbf{k}}(i) \approx \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i\}u_{\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{w}_i), \quad E_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}). \quad (19)$$

Где $\mathbf{R}_i$ обозначает положение центра той элементарной ячейки, в которой находится i -й атом, а $\mathbf{w}_i \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i$ – расстояние от атома до этого центра. Волновой вектор $\mathbf{k}$ пробегает значения в зоне Бриллюэна (BZ). В этом же приближении

$$\nu(E) = \sum_{\mu} \int_{\text{BZ}} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \delta(E - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})), \quad (20)$$

В частности, для простой d -мерной гиперкубической решетки имеется всего одна зона, причем $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t \sum_{l=1}^d \cos k_l$ (постоянную решетки мы положили равной единице). Очевидно, что зона Бриллюэна представляет собой гиперкуб $-\pi < k_l < \pi$, причем максимальное значение энергии $\varepsilon_{\max} = 2td$ достигается в ее центре $k_l = 0$, а минимальное – $\varepsilon_{\min} = -2td$ – в угле $k_l = \pi$. Плотность состояний обращается в нуль вне интервала $\varepsilon_{\min} < E < \varepsilon_{\max}$, а на его границах имеет особенности (они называются ван-хововскими).

Выясним, как ведет себя плотность состояний вблизи ван-хововских особенностей. При $k_l \ll 1$ мы можем записать $\varepsilon(\mathbf{k}) \approx \varepsilon_{\max} - tk^2$, так что

$$\begin{aligned} \nu(E) &\approx \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \delta(tk^2 - (\varepsilon_{\max} - E)) \propto \int_0^{\infty} k^{d-1} dk \delta(tk^2 - (\varepsilon_{\max} - E)) \propto \\ &\propto \frac{\theta(\varepsilon_{\max} - E)}{t} \left(\frac{\varepsilon_{\max} - E}{t} \right)^{(d-2)/2}. \end{aligned} \quad (21)$$

Вычисления вблизи точки $E = \varepsilon_{\min}$ проводятся совершенно аналогично. Вообще плотность состояний для гиперкубической решетки – четная функция энергии. В одномерном случае легко получить аналитическое выражение для $\nu(E)$ во всей области энергий:

$$\nu_{d=1}(E) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \delta(2t \cos k - E) = \frac{\theta(2t - |E|)}{2\pi t \sqrt{1 - (E/2t)^2}}. \quad (22)$$

Итак, в одномерном случае плотность состояний в ван-хововской точке расходится корневым образом, в двумерном – испытывает скачок, в трехмерном – корневым образом обращается в ноль.

Перейдем теперь к учету поправок к средней плотности состояний. Ясно, что разложение начинается с членов порядка $(W/t)^2$. С помощью крестовой диаграммной техники мы можем найти собственно энергетическую часть:

$$\Sigma_E(\mathbf{k}) = \langle \epsilon^2 \rangle \int \frac{d^d \mathbf{q}}{2\pi^d} G_E^{(R)}(\mathbf{q}), \quad (23)$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} \epsilon^2 d\epsilon = \frac{W^2}{12}. \quad (24)$$

Воспользовавшись формулами (164), (13) и стандартным выражением для второй поправки к функции Грина, мы получим

$$\begin{aligned} \nu^{(2)}(E) &= \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{\pi \mathcal{V}} \text{Im} \left\{ \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' G_E^{(R)}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) G_E^{(R)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) G_E^{(R)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right\} = \\ &= \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{\pi \mathcal{V}} \text{Im} \left\{ \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' G_E^{(R)}(\mathbf{r}') G_E^{(R)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) G_E^{(R)}(-\mathbf{r}') \right\} = \\ &= \frac{\langle \epsilon^2 \rangle}{\pi} \text{Im} \left\{ \int \frac{d^d \mathbf{k}}{2\pi^d} \frac{d^d \mathbf{q}}{2\pi^d} [G_E^{(R)}(\mathbf{k})]^2 G_E^{(R)}(\mathbf{q}) \right\}, \end{aligned} \quad (25)$$

3.3 Задачи

3.3.1 Роль резонансных пар

Для случая сильного беспорядка в модели Андерсона с распределением (3) вычислите поправку к формуле (16) в окрестности точек $E = \pm W/2$. Учитывайте возможность образования резонансных пар: соседних узлов с очень близкими значениями ϵ .

3.3.2 Рассеяние в модели Андерсона при слабом беспорядке

Рассмотрите трехмерный вариант модели Андерсона с распределением (3), при условии $W \ll t$. Найдите длину свободного пробега $l(\mathbf{k})$ для частицы с волновым вектором $\mathbf{k}$. Найдите положение порогов подвижности E_m из условия $l \sim \lambda$, где λ – длина волны частицы.

4 Плотность состояний в модели Ллойда: точное решение.

Сейчас мы покажем, что для распределения

$$P_{Li}(\epsilon) = \frac{\Gamma}{\pi(\epsilon^2 + \Gamma^2)}, \quad (26)$$

среднюю плотность состояний можно вычислить точно.

Зафиксируем какой-нибудь узел i_0 и запишем выражение для точной функции Грина $G_{ii'} \equiv G_{ii'}^R(E|\{\epsilon\})$ (где $\{\epsilon\} \equiv \{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{i_0}, \dots\}$ обозначает набор всех ϵ_j на всех узлах j) с помощью теории возмущений по ϵ_{i_0}

$$\begin{aligned} G_{ii'} &= G_{ii'}^{(0)} + G_{ii_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i'}^{(0)} + G_{ii_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i'}^{(0)} + \\ &+ G_{ii_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i_0}^{(0)} \epsilon_{i_0} G_{i_0 i'}^{(0)} + \dots = G_{ii'}^{(0)} + G_{ii_0}^{(0)} \frac{\epsilon_{i_0}}{1 - \epsilon_{i_0} G_{i_0 i_0}^{(0)}} G_{i_0 i'}^{(0)}, \end{aligned} \quad (27)$$

где $G_{ii'}^{(0)} \equiv G_{ii'}^R(E|\{\epsilon\}^{(0)})$, а $\{\epsilon\}^{(0)} \equiv \{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{i_0} = 0, \dots\}$. Усредним теперь полученное выражение по беспорядку на узле i_0 :

$$\langle G_{ii'} \rangle_{i_0} = \int \frac{\Gamma d\epsilon_{i_0}}{\pi(\epsilon_{i_0}^2 + \Gamma^2)} G_{ii'} = G_{ii'}^{(0)} + G_{ii_0}^{(0)} \int \frac{\Gamma \epsilon_{i_0} d\epsilon_{i_0}}{\pi(\epsilon_{i_0}^2 + \Gamma^2)(1 - \epsilon_{i_0} G_{i_0 i_0}^{(0)})} G_{i_0 i'}^{(0)}. \quad (28)$$

Имея в виду, что мнимая часть запаздывающей функции Грина $G_{i_0 i_0}^{(0)}$ отрицательна:

$$\text{Im} G_{i_0 i_0}^{(0)} = -\pi \nu(i_0, E, \{\epsilon\}^{(0)}) < 0, \quad (29)$$

мы видим, что в нижней полуплоскости комплексного ϵ_{i_0} подынтегральное выражение имеет только один полюс – в точке $\epsilon_{i_0} = -i\Gamma$. Это означает, что интеграл легко вычислить, замыкая контур в нижней полуплоскости и определяя вычет в точке $-i\Gamma$:

$$\begin{aligned} \langle G_{ii'} \rangle_{i_0} &= \int \frac{\Gamma d\epsilon_{i_0}}{\pi(\epsilon_{i_0}^2 + \Gamma^2)} G_{ii'} = G_{ii'}^{(0)} + G_{ii_0}^{(0)} \frac{(-i\Gamma)}{1 - (-i\Gamma) G_{i_0 i_0}^{(0)}} G_{i_0 i'}^{(0)} = \\ &= G_{ii'}^R(E|\{\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_{i_0} = -i\Gamma, \dots\}). \end{aligned} \quad (30)$$

Этот результат – частный случай общей формулы

$$\int \frac{\Gamma d\epsilon}{\pi(\epsilon^2 + \Gamma^2)} f(\epsilon) = f(-i\Gamma), \quad (31)$$

справедливой для любой функции $f(\epsilon)$, аналитичной в нижней полуплоскости (и не слишком быстро растущей, так чтобы интеграл по большому кругу занулялся).

Продельвая последовательно эту же процедуру усреднения по всем переменным ϵ_j , мы получим замечательный результат для полностью усредненной функции Грина

$$\begin{aligned}\langle G_{ii'} \rangle &= G_{ii'}^R(E | \{\epsilon_1 = -i\Gamma, \epsilon_2 = -i\Gamma, \dots, \epsilon_3 = -i\Gamma, \dots\}) = \\ &= G_{ii'}^R(E + i\Gamma | \{\epsilon_1 = 0, \epsilon_2 = 0, \dots, \epsilon_3 = 0, \dots\}) = \\ &= \sum_{\mu} \int_{\text{BZ}} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\psi_{\mu, \mathbf{k}}(i) \psi_{\mu, \mathbf{k}}^*(i')}{E + i\Gamma - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})},\end{aligned}\quad (32)$$

из которого следует точное выражение для средней плотности состояний

$$\begin{aligned}\bar{\nu}(E) &= -\frac{1}{\pi} \sum_{\mu} \int_{\text{BZ}} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \text{Im} \left\{ \frac{1}{E + i\Gamma - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k})} \right\} = \\ &= \sum_{\mu} \int_{\text{BZ}} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\Gamma/\pi}{(E - \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}))^2 + \Gamma^2} = \frac{\Gamma}{\pi} \int \frac{\nu_0(\varepsilon) d\varepsilon}{(E - \varepsilon)^2 + \Gamma^2},\end{aligned}\quad (33)$$

где $\nu_0(\varepsilon)$ – плотность состояний в задаче без беспорядка. В частности, в металлической области энергий, где $\nu_0(\varepsilon)$ слабо меняется на масштабе $|E - \varepsilon| \sim \Gamma$, удобно переписать (33) в виде

$$\bar{\nu}(E) = \nu_0(E) + \Delta\nu(\varepsilon), \quad \Delta\nu(\varepsilon) = \left(\frac{\Gamma}{\pi} \right) \text{v.p.} \int \frac{(\nu_0(\varepsilon) - \nu_0(E)) d\varepsilon}{(E - \varepsilon)^2}, \quad (34)$$

где v.p. означает главное значение интеграла. Основной вклад в $\Delta\nu(\varepsilon)$ дает не малая окрестность точки $\varepsilon = E$, как можно было бы ожидать, а вся зона Бриллюэна (т.е., $|\varepsilon - E| \sim E_B$, где E_B – ширина зоны). Именно поэтому в знаменателе можно было пренебречь слагаемым Γ^2 . Важно также отметить, что найденная нами неквазиклассическая поправка в плотности состояний пропорциональна первой степени Γ , т.е. $\Delta\nu/\nu_0 \sim (k_F l)^{-1/2}$ – не аналитична по $1/k_F l$. Все это – результат недостаточно быстрого спадания лоренцевской функции распределения при больших энергиях.

Плотность состояний, описываемая формулой (33) нигде не обращается в нуль, несмотря на то, что исходная плотность $\nu_0(\varepsilon)$ может быть (и обычно бывает) сосредоточена в конечной области энергий. В частности, при очень больших энергиях $|E| \gg E_B, \Gamma$

$$\bar{\nu}(E) = \frac{\Gamma}{\pi E^2}. \quad (35)$$

Вывод выражения для усредненной функции Грина не использовал никаких конкретных предположений о структуре невозмущенного гамильтониана, в частности, трансляционной инвариантности. В общем случае, если для некоторой – пусть даже и неоднородной – системы известно явное выражение для функции Грина $G_{ii}^R(E)$ в отсутствие беспорядка, то усредненная плотность состояний $\bar{\nu}_\Gamma(E)$ в соответствующей модели, к которой добавлен беспорядок, описываемый моделью Ллойда, также может быть найдена с помощью аналитического продолжения:

$$\bar{\nu}_\Gamma(E) = -\frac{1}{\pi\mathcal{V}} \sum_i \text{Im}\{G_{ii}^R(E + i\Gamma)\}. \quad (36)$$

Возможность получения точного результата для плотности состояний в модели Ллойда связана с аналитическими свойствами функции Грина, через которую выражается плотность состояний. Аналогичные точные результаты можно было бы получить и для любой другой физической величины, которую удастся выразить только через запаздывающую (или только через опережающую) функцию Грина. Напротив, те величины, в определение которых одновременно входят как запаздывающие, так и опережающие функции Грина, таким способом усреднять нельзя. В частности это относится к проводимости, поэтому надежда на точное решение проблемы локализации в модели Ллойда оказывается тщетной. Все равно, представляется удивительным, что в системе, в которой при некотором уровне беспорядка (в трехмерной модели Ллойда при $|E| = E_m \sim 6t + \Gamma$) имеется порог подвижности, проявляющийся, в частности, в обращении в нуль проводимости при $|E| > E_m$. Средняя же плотность состояний оказывается совершенно нечувствительной к локализации и остается аналитической при всех энергиях, в том числе и при $|E| = E_m$.

4.1 Задачи

4.1.1 Плотность состояний в одномерной модели Ллойда

Найдите явное выражение для средней плотности состояний в модели Ллойда для одномерной цепочки.

5 Хвосты плотности состояний и их роль в оптике

Наличие беспорядка приводит к тому, что спектр собственных состояний системы уже не оказывается ограничен зоной проводимости $-E_b <$

$E < E_b$, возникают состояния, лежащие в запрещенной зоне. Если беспорядок относительно слаб ($W \ll E_b$), то плотность состояний должна быстро (как правило, экспоненциально) убывать при удалении от края вглубь запрещенной зоны. Благодаря слабости беспорядка это убывание происходит на масштабе $|E| - E_c \sim \Delta E$, причем масштаб величины ΔE убывает с уменьшением величины беспорядка. Область энергий, где значения $\nu(E)$ уже очень малы, называется “хвостом плотности состояний”.

Хвосты плотности состояний имеют важное практическое значение для оптики полупроводников и диэлектриков. Дело в том, что идеально чистый полупроводник не поглощает свет с энергией $\hbar\omega < E_g$, где E_g – ширина запрещенной зоны. Ненулевое поглощение в этой области возникает именно за счет состояний в хвостах плотности состояний, причем коэффициент поглощения света I определяется переходами между состояниями в двух разных хвостах:

$$I(\omega) \propto \int_0^\infty d\epsilon_c \int_0^\infty d\epsilon_v \nu_c(\epsilon_c) \nu_v(\epsilon_v) \delta(\epsilon_c + \epsilon_v - \hbar\omega) \quad (37)$$

где ν_c и ν_v плотности состояний, соответственно, в зоне проводимости и в валентной зоне. Энергия ϵ_c отсчитывается вниз от дна зоны проводимости, а ϵ_v – вверх от потолка валентной зоны. Если хвост в одной из этих двух зон спадает медленнее, чем в другой (обычно это так, если эффективные массы в них различаются), то главный вклад в поглощение дают переходы между состояниями в хвосте этой (более “хвостатой”) зоны и состояниями вблизи дна (или потолка) другой; формула (37) сводится к:

$$I(\omega) \propto \nu_c(\hbar\omega). \quad (38)$$

Наиболее простым для рассмотрения (но не слишком важным для приложений) является случай плотности состояний в глубине широкозонного ($E_g \gg t$) диэлектрика. Как мы уже выяснили, при $|E| \gg t, W$ состояния сильно локализованы и их плотность просто повторяет распределение локального беспорядка: $\nu(E) = P(\epsilon = |E|)$.

С точки зрения теории полупроводников наибольший интерес представляет исследование поведения $\nu(E)$ при $\Delta E \ll |E| - E_c \ll E_c$, где, с одной стороны, плотность состояний уже мала, а, с другой, еще можно пользоваться квадратичным разложением спектра $E(\mathbf{k}) \approx -E_c + \mathbf{k}^2/2m$ (это разложение еще называют приближением эффективной массы) и, соответственно, континуальным представлением для уравнения Шредингера:

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (39)$$

в случайном потенциале $V(\mathbf{r})$. Мы сосредоточимся именно на этом случае. Заметим, что, для определенности, мы выбрали для исследования область энергий вблизи дна зоны проводимости, и E у нас теперь отсчитывается от нижнего края зоны проводимости $-E_c$. Вообще говоря, континуальное уравнение (39) применимо к гораздо более широкому классу моделей, чем модель Андерсона – лишь бы энергия лежала вблизи края зоны.

6 Хвосты плотности состояний для случая гауссова случайного потенциала

Во многих практически важных случаях можно считать, что вероятность конкретной реализации случайного потенциала описывается гауссовым распределением

$$P\{V\} = A \exp\{-S\{V\}\}, \quad S\{V\} = \frac{1}{2} \int d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (40)$$

где A – нормировочный множитель, определяемый условием $\int \mathcal{D}V P\{V\} = 1$, а ядро $\gamma(\mathbf{r})$ связано с корреляционной функцией потенциалов

$$g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \langle V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \rangle = \int \mathcal{D}V V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') P\{V\} \quad (41)$$

соотношением $\hat{\gamma} = \hat{g}^{-1}$, т.е.,

$$\int d^d \mathbf{r}' \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') g(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}''). \quad (42)$$

Обе функции: $\gamma(\mathbf{r})$ и $g(\mathbf{r})$ спадают на одном и том же пространственном масштабе a_0 . Подчеркнем, что распределение (40) является обобщением распределения (4) так как допускает корреляцию значения случайного потенциала в различных точках пространства.

Средняя (т.е., усредненная по реализациям случайного потенциала V) плотность состояний дается выражением

$$\langle \nu(E) \rangle = \int P\{V\} \mathcal{D}V \sum_{\alpha} \delta[E_{\alpha}(\{V\}) - E]. \quad (43)$$

При любой фиксированной конфигурации потенциала $V(\mathbf{r}')$ спектр собственных значений ограничен снизу энергией E_0 соответствующего основного состояния: $E_{\alpha}(\{V\}) \geq E_0(\{V\})$.

6.1 Метод оптимальной флуктуации

Нас интересует средняя плотность состояний при таких энергиях E , при которых $\langle \nu(E) \rangle$ экспоненциально мало. Это наводит на мысль о том, что функциональный интеграл (43) должен вычисляться по методу перевала: главный вклад в него даст малая окрестность некоторого оптимального потенциала $V_{\text{opt}}(\mathbf{r}|E)$. Этот потенциал должен обеспечивать минимум выражения, стоящего в показателе экспоненты (т.е., $S\{V\}$) при выполнении дополнительного условия существования в данном потенциале уровня с энергией E . Ясно, что для большого отрицательного E при углублении потенциальной ямы величина E впервые попадает в спектр собственных значений именно как энергия основного состояния $E_0(\{V\})$. Поэтому нахождение $V_{\text{opt}}(\mathbf{r}|E)$ сводится к решению следующей вариационной задачи:

$$S\{V\} \rightarrow \min \quad \text{при условии } E_0(\{V\}) = E. \quad (44)$$

Согласно общему рецепту вариационного исчисления для этого нужно найти безусловный экстремум $V_\lambda(\mathbf{r})$ функционала

$$\tilde{S}_\lambda\{V\} = S\{V\} - \lambda E_0(\{V\}), \quad (45)$$

и, после этого, определить параметр $\lambda = \lambda(E)$ из условия

$$E_0(\{V_\lambda\}) = E. \quad (46)$$

К сожалению, непосредственное аналитическое решение этой задачи невозможно, так как невозможно найти энергию основного состояния $E_0(\{V\})$ в ПРОИЗВОЛЬНОМ потенциале $V(\mathbf{r})$. Чтобы обойти эту трудность, мы воспользуемся следующим трюком: Представим $E_0(\{V\})$, как решение другой вариационной задачи (той самой, которая приводит к уравнению Шредингера)

$$\varepsilon_{\{V\}}(\{\psi\}) \equiv \int d^d \mathbf{r} \left\{ \frac{|\nabla \psi(\mathbf{r})|^2}{2m} + V(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2 \right\} \rightarrow \min \quad (47)$$

$$\text{при условии } N(\{\psi\}) \equiv \int d^d \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1, \quad (48)$$

причем $E_0(\{V\}) = \varepsilon_{\{V\}}(\{\psi_{\{V\}}\})$, где $\psi_{\{V\}}$ – решение задачи (47,48). В результате, мы можем сформулировать нашу исходную вариационную

задачу следующим образом:

$$\frac{\delta \tilde{S}}{\delta V(\mathbf{r})} = 0, \quad (49)$$

$$\frac{\delta \tilde{S}}{\delta \psi(\mathbf{r})} = 0, \quad (50)$$

$$\tilde{S} = S\{V\} - \lambda \varepsilon_{\{V\}}(\{\psi\}) - \eta N(\{\psi\}), \quad (51)$$

а лагранжевы множители λ, η должны определяться из дополнительных условий

$$N(\{\psi\}) = 1, \quad (52)$$

$$\varepsilon_{\{V\}}(\{\psi\}) = E, \quad (53)$$

В этой постановке задачи все входящие в нее выражения уже имеют явную аналитическую форму. Правда, за это нам пришлось заплатить введением новой независимой вариационной переменной ψ .

Подставляя в (49) явные выражения, мы приходим к уравнению

$$\int d^d \mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \lambda |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (54)$$

позволяющему в дальнейшем исключить потенциал, выразив его через ψ в виде

$$V(\mathbf{r}) = \lambda \int d^d \mathbf{r}' g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2. \quad (55)$$

С другой стороны, подстановка явных выражений в (50) приводит к

$$\lambda \left\{ -\frac{\nabla^2 \psi(\mathbf{r})}{2m} + V(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right\} + \eta \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (56)$$

что, в сочетании с условиями (52,53), позволяет исключить параметр η , выразив его в виде $\eta = -E\lambda$. Окончательно, мы приходим к нелинейному уравнению Шредингера

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2m} + \lambda \int d^d \mathbf{r}' g(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi(\mathbf{r}')|^2 - E \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (57)$$

с дополнительным условием

$$\int d^d \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1. \quad (58)$$

Волновая функция, описывающая решение нашей задачи, имеет некоторый пространственный масштаб $a = a(E)$. Его мы определим позже, а сейчас только отметим, что решение должно иметь существенно различный характер в зависимости от соотношения между a и a_0 – корреляционным радиусом случайного потенциала.

6.2 Случай ”пространственного белого шума”.

Мы начнем со случая $a_0 \ll a$, когда пространственными корреляциями случайного потенциала можно пренебречь и записать

$$g(\mathbf{r}) = g_0 \delta(\mathbf{r}), \quad (59)$$

так что (57) принимает вид

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2m} + \lambda g_0 |\psi(\mathbf{r})|^2 - E \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (60)$$

Удобно сделать масштабное преобразование $\mathbf{r} = a\mathbf{x}$, $\psi = a^{-d/2}\varphi$, где

$$a = (m|E|)^{-1/2}. \quad (61)$$

В результате для новой функции φ мы приходим к уравнениям

$$\left\{ -\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2} - \Lambda |\varphi(\mathbf{x})|^2 + 1 \right\} \varphi(\mathbf{x}) = 0, \quad \int d^d \mathbf{x} |\varphi(\mathbf{x})|^2 = 1, \quad \Lambda = -\lambda g_0 / |E|. \quad (62)$$

В этих уравнениях уже не содержится никаких внешних параметров, поэтому их решение должно иметь универсальный вид

$$\varphi(\mathbf{x}) = \varphi_{\text{opt}}(\mathbf{x}), \quad \Lambda = \Lambda_{\text{opt}}. \quad (63)$$

Соответствующее значение показателя экспоненты

$$\begin{aligned} S_{\text{opt}} &= \frac{g_0 \lambda^2}{2} \int d^d \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^4 = \\ &= \frac{g_0 (\Lambda_{\text{opt}} |E| / g_0)^2 (m|E|)^{-d/2}}{2} \int d^d \mathbf{x} |\varphi_{\text{opt}}(\mathbf{x})|^4 = C_d \frac{|E|^{2-d/2}}{g_0 m^{d/2}}, \end{aligned} \quad (64)$$

$$C_d = \frac{\Lambda_{\text{opt}}^2}{2} \int d^d \mathbf{x} |\varphi_{\text{opt}}(\mathbf{x})|^4. \quad (65)$$

Определить функцию $\varphi(\mathbf{x})$ и константы Λ_{opt} C_d в общем случае аналитически невозможно. Исключение представляет одномерная система (см. задачу 6.5.1).

6.3 Случай “плавного потенциала”.

В этом случае $a \ll a_0$ и случайный потенциал можно считать квазиклассическим – слабо изменяющимся на масштабе изменения волновой функции. Это означает, что волновая функция будет сосредоточена в непосредственной близости от самой глубокой точки потенциальной ямы, и

$$E_0 \approx \min V(\mathbf{r}). \quad (66)$$

Тогда вариационная задача (44) может быть сформулирована в аналитическом виде уже в терминах самого случайного потенциала $V(\mathbf{r})$, без введения волновой функции. Выбирая точку, где потенциал достигает минимума, за начало координат (в экспоненциальном приближении выбор этой точки ни на что не влияет, но, при вычислении предэкспоненты, как мы увидим, тут нужно быть аккуратным), мы можем переписать (45) в виде

$$\tilde{S}_\lambda\{V\} = S\{V\} - \lambda V(0). \quad (67)$$

Варьирование этого выражения по V приводит к уравнению

$$\int d^d \mathbf{r}' V(\mathbf{r}') \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \lambda \delta(\mathbf{r}), \quad (68)$$

решение которого

$$V(\mathbf{r}) = \lambda g(\mathbf{r}). \quad (69)$$

Вспоминая, что $V(0) = -|E_0|$, мы находим параметр λ :

$$\lambda = -|E_0|/g(0), \quad (70)$$

и, окончательно,

$$S = \frac{\lambda^2}{2} \int d^d \mathbf{r} d^d \mathbf{r}' g(\mathbf{r}) g(\mathbf{r}') \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\lambda^2 g(0)}{2} = \frac{E_0^2}{2g(0)}. \quad (71)$$

Заметим, что в выражение (71) не входит масса электрона m . Действительно, описанный выше механизм описывает квазиклассическую локализацию электрона в яме, которая определяется в основном его потенциальной энергией, сильно превышающей кинетическую (куда только и входит масса). Учет кинетической энергии приводит только к относительно малой поправке к действию S .

6.4 Итоги

Итак, мы получили, что “ближний хвост” плотности состояний описывается формулой (64), а дальний – формулой (71):

$$\nu(E) \propto \exp(-S(E)), \quad (72)$$

$$S(E) = \begin{cases} C_d \frac{|E|^{2-d/2}}{m^{d/2} \left[\int d^d \mathbf{r} g(\mathbf{r}) \right]}, & \text{при } \epsilon_1 \ll |E| \ll \epsilon_2, \\ E^2/2g(0), & \text{при } |E| \gg \epsilon_2. \end{cases} \quad (73)$$

где

$$\epsilon_1 = m^{\frac{d}{d-4}} \left[\int d^d \mathbf{r} g(\mathbf{r}) \right]^{\frac{2}{d-4}}, \quad \epsilon_2 = \frac{1}{ma_0^2}, \quad (74)$$

а универсальная константа C_d , зависящая только от размерности пространства d , определена формулой (65).

Выше мы принимали во внимание только экспоненциальные множители в плотности состояний, интересно, однако, определить и предэкспоненциальный множитель. В принципе это весьма сложная проблема, но если не стремиться решить ее точно, а ограничиться оценкой с точностью до неизвестного численного фактора, то задача сильно облегчается. Именно такой оценкой мы и ограничимся в этих лекциях. Заметим, что точное вычисление численного фактора оставалось нерешенной задачей в течение многих лет: существовало несколько различных ответов, полученных разными авторами с помощью разных методов, и люди все никак не могли разобраться, какой из них – правильный.

6.5 Задачи

6.5.1 Одномерный случай

Решите нелинейное уравнение Шредингера (62) для случая одномерной системы со случайным потенциалом типа “белый шум”.

6.5.2 Поправки в случае плавного потенциала

Как мы выяснили, в случае плавного потенциала (когда корреляционная длина a_0 велика) показатель экспоненты $S(T)$ в плотности состояний в

главном приближении вовсе не зависит от a_0 . Найдите первую исчезающую поправку к $S(T)$ в разложении по малой величине $1/a_0$. В качестве определения корреляционной длины воспользуйтесь формулой

$$\frac{1}{a_0^2} \equiv \frac{1}{g(0)} \left. \frac{d^2 g(r)}{dr^2} \right|_{r=0}. \quad (75)$$

7 Предэкспоненциальный множитель в вероятности оптимальной флуктуации

Выше мы принимали во внимание только экспоненциальные множители в плотности состояний, интересно, однако, определить и предэкспоненциальный множитель. В принципе это весьма сложная проблема, но если не стремиться решить ее точно, а ограничиться оценкой с точностью до неизвестного численного фактора, то задача сильно облегчается. Именно такой оценкой мы и ограничимся в этих лекциях. Заметим, что точное вычисление численного фактора оставалось нерешенной задачей в течение многих лет: существовало несколько различных ответов, полученных разными авторами с помощью разных методов, и люди все никак не могли разобраться, какой из них – правильный.

Для начала нам нужно более аккуратно записать выражение для плотности состояний

$$\bar{\nu}(E) = \frac{1}{\mathcal{V}} \int \mathcal{D}V P\{V\} \delta(E - E_0\{V\}), \quad (76)$$

где $E_0\{V\}$ – энергия основного состояния электрона в заданном потенциале V . Формула (76) отличается от (43) тем, что в ней не учтены возбужденные состояния, дающие при вычислении хвоста лишь экспоненциально малый вклад. Используя стандартное представление для дельта-функции, получим

$$\bar{\nu}(E) = \frac{A}{\mathcal{V}} \int \frac{dQ}{2\pi} \int \mathcal{D}V \exp\{-S\{V\} + iQ(E - E_0\{V\})\}. \quad (77)$$

Применение метода перевала к этому интегралу приводит к вариационной задаче, рассмотренной нами выше, нужно только отождествить $iQ \rightarrow -\lambda$. Итак, перевальные значения $V_0(\mathbf{r})$ и $Q_0 = -\lambda_0$ определяются решением уравнений, выведенных в предыдущих разделах. Для нахождения предэкспоненциального множителя мы должны учесть отклонения $v(\mathbf{r}) \equiv V(\mathbf{r}) - V_0(\mathbf{r})$ и $q \equiv Q - Q_0$, разложив показатель экспоненты

до второго порядка по v и q .

$$\bar{v}(E) = \frac{\mathcal{F}A}{\mathcal{V}} \exp\{-S\{V_0\}\}, \quad (78)$$

$$\mathcal{F} = \int \frac{dq}{2\pi} \int \mathcal{D}v \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' v(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}') B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - iq \int d\mathbf{r} v(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) \right\}, \quad (79)$$

$$B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \left. \frac{\delta^2 \tilde{S}\{V\}}{\delta V(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}')} \right|_{V=V_0} = \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - iQ_0 \left. \frac{\delta^2 E_0\{V\}}{\delta V(\mathbf{r}) \delta V(\mathbf{r}')} \right|_{V=V_0}, \quad (80)$$

$$F(\mathbf{r}) = \left. \frac{\delta E_0\{V\}}{\delta V(\mathbf{r})} \right|_{V=V_0}. \quad (81)$$

Введем собственные числа b_i и ортонормированные собственные векторы $\psi_i(\mathbf{r})$ матрицы B :

$$\int d\mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = b_i \psi_i(\mathbf{r}'), \quad \int d\mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij}, \quad (82)$$

и разложим $v(\mathbf{r})$ по базису $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$v(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (83)$$

В этом базисе функциональный интеграл (79) приобретает вид

$$\mathcal{F} = \int \frac{dq}{2\pi} \int \prod_i dc_i \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i b_i c_i^2 - iq \sum_i c_i F_i \right\}, \quad (84)$$

$$F_i = \int d\mathbf{r} \psi_i(\mathbf{r}) F(\mathbf{r}) \quad (85)$$

7.1 Нулевые моды

При вычислении гауссова интеграла (84) особое внимание следует обратить на нулевые собственные моды $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ матрицы $B(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ (индекс α нумерует декартовы координаты)

$$\psi_\alpha(\mathbf{r}) = u_\alpha \partial_{r_\alpha} V_0(\mathbf{r}), \quad u_\alpha = \left[\int d\mathbf{r} (\partial_{r_\alpha} V_0(\mathbf{r}))^2 \right]^{-1/2}. \quad (86)$$

$$b_\alpha = 0, \quad F_\alpha = 0. \quad (87)$$

Действительно, благодаря наличию трансляционной инвариантности, значение $\tilde{S}$ должно оставаться неизменным при сдвиге оптимальной флуктуации: $V_0(\mathbf{r}) \rightarrow V_0(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r})$. Это, в частности, означает, что

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \Delta\mathbf{r}} = \int d\mathbf{r} \frac{\partial V_0(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \frac{\delta \tilde{S}\{V\}}{\delta V(\mathbf{r})} \Big|_{V=V_0} = 0, \quad (88)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \tilde{S}}{\partial \Delta\mathbf{r}_\alpha \partial \Delta\mathbf{r}_\beta} &= \int d\mathbf{r} \frac{\partial^2 V_0(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_\alpha \partial \mathbf{r}_\beta} \frac{\delta \tilde{S}\{V\}}{\delta V(\mathbf{r})} \Big|_{V=V_0} + \\ &+ \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\partial V_0(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_\alpha} \frac{\partial V_0(\mathbf{r}')}{\partial \mathbf{r}'_\beta} B(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 0, \end{aligned} \quad (89)$$

Условие (88) выполняется в силу экстремальности действия, первое слагаемое в (89) равно нулю по той же причине, а второе как раз и означает ортогональность вектора $\frac{\partial V_0(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}$ к матрице B . Точно так же доказывается и ортогональность нулевых мод а функции $F(\mathbf{r})$ (исходя из трансляционной инвариантности величины $E_0\{V\}$). В результате вклад интегрирования по нулевым модам в (84) приобретает тривиальный вид

$$\mathcal{F}_{\text{zero}} = \prod_{\alpha} \int dc_{\alpha} \quad (90)$$

и формально расходится. Эту расходимость, однако, можно устранить, если вспомнить о конечности системы. Записывая вклад нулевых мод в v и учитывая, что, вследствие сферической симметрии оптимальной флуктуации все u_{α} одинаковы и равны u_{zero} ,

$$v^{(\text{zero})}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) = u_{\text{zero}} \sum_{\alpha} c_{\alpha} \partial_{r_{\alpha}} V_0(\mathbf{r}) = u_{\text{zero}} (\vec{c} \cdot \vec{\nabla}) V_0(\mathbf{r}), \quad (91)$$

мы осознаем, что нулевые моды соответствуют пространственным сдвигам оптимальной флуктуации, как целого, причем величину $u_{\text{zero}} \vec{c}$ можно отождествить со сдвигом центра флуктуации. Поскольку положение центра ограничено объемом системы, мы получаем

$$\mathcal{F}_{\text{zero}} = u_{\text{zero}}^{-d} \mathcal{V} \quad (92)$$

Возникший “бесконечный” множитель $\mathcal{V}$ сокращается с таким же множителем в знаменателе формулы (77) и мы осознаем, что расходимость связанная с нулевыми модами имеет глубокий физический смысл: она отражает тот факт, что центр оптимальной флуктуации может с равной вероятностью оказаться в любой точке образца.

7.2 Ненулевые моды

Можно показать (мы этим заниматься не будем, что все остальные моды вносят в предэкспоненциальный множитель только численный фактор порядка единицы:

$$\mathcal{F}_{\text{nonzero}} \sim 1 \quad (93)$$

Полносимметричная мода

$$\psi_0(\mathbf{r}) = u_0 V_0(\mathbf{r}), \quad u_0 = \left[\int d^d \mathbf{r} V_0^2(\mathbf{r}) \right]^{-1/2}, \quad (94)$$

$$b_0 = u_0^2 \left. \frac{d^2 \tilde{S}\{(1+y)V_0(\mathbf{r})\}}{dy^2} \right|_{y=0}, \quad (95)$$

$$F_0 = u_0 \left. \frac{dE_0\{(1+y)V_0(\mathbf{r})\}}{dy} \right|_{y=0}. \quad (96)$$

Полносимметричная мода – единственная, приводящая к изменению энергии E_0 (т.е. не ортогональная функции $F(\mathbf{r})$). Поэтому ее полный вклад в предэкспоненциальный множитель

$$\mathcal{F}_0 = \int \frac{dq dc_0}{2\pi} \int \exp \left\{ -\frac{b_0 c_0^2}{2} - i q c_0 F_0 \right\} = \frac{1}{F_0}, \quad (97)$$

$$\begin{aligned} \bar{\nu}(E) &= \exp\{-S\{V_0\}\} \\ &\times A u^{-d} \int \frac{dq}{2\pi} \int \prod_i^{\text{nonzero}} dc_i \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i b_i c_i^2 - i q \sum_i c_i F_i \right\} = \\ &= \exp\{-S\{V_0\}\} A u^{-d} \int \frac{dq}{2\pi} \prod_i^{\text{nonzero}} (2\pi/b_i)^{1/2} \exp\{-q^2 F_i^2/2b_i\} = \\ &= \exp\{-S\{V_0\}\} A u^{-d} (2\pi)^{1/2} \left[\sum_i^{\text{nonzero}} F_i^2/b_i \right]^{-1/2} \prod_i^{\text{nonzero}} (2\pi/b_i)^{1/2}, \end{aligned} \quad (98)$$

где все суммы и произведения берутся только по ненулевым модам. Оценим по порядку величины факторы, входящие в предэкспоненциальный множитель (98).

$$u \sim [a^{d-2}|E|^2]^{-1/2} \sim \frac{a}{|E|a^{d/2}} \sim \frac{a}{[g_0 S_{\text{opt}}(E)]^{1/2}}, \quad (99)$$

$$b_i \sim a^d S_{\text{opt}}(E)/E^2, \quad F_i \sim a^{d/2}, \quad F_i^2/b_i \sim E^2/S_{\text{opt}}(E). \quad (100)$$

Здесь самый важный множитель (из предэкспоненциальных) $u^{-d} \sim \left[a \sqrt{S_{\text{opt}}(E)} \right]^{-d}$. Все остальное собирается в множитель $c/|E|$, где численный фактор c порядка единицы (его точное значение определить весьма нелегко). В результате получаем

$$\bar{\nu}(E) = c \frac{S_{\text{opt}}(E)^{d/2}}{|E|a^d} \exp\{-S_{\text{opt}}(E)\} \quad (101)$$

8 Плотность состояний вблизи границы спектра в модели Андерсона с ограниченными флуктуациями

В рассмотренном выше случае гауссова случайного потенциала хвост плотности состояний простирается неограниченно глубоко: $\nu(E) \neq 0$ для сколь угодно больших отрицательных E . Это связано с неограниченностью самих гауссовых флуктуаций. В случае же ограниченных флуктуаций (см. формулу (3)), рассматриваемых в модели Андерсона, плотность состояний обращается в нуль вне некоторого конечного интервала энергий.

Действительно, рассмотрим снова модель Андерсона на гиперкубической решетке. В отсутствие беспорядка (при $W = 0$) спектр гамильтониана (2) заключен в интервале $-2dt < \varepsilon < 2dt$. Ясно, что при $W \neq 0$ наиболее отрицательная энергия может достигаться в такой конфигурации $\mathcal{C}_-$, в которой все $\epsilon_i = -W/2$, а наиболее положительная – в конфигурации $\mathcal{C}_+$, в которой все $\epsilon_i = +W/2$. Обе эти конфигурации обладают трансляционной инвариантностью, и спектр энергий в них отличается от спектра при $W = 0$ сдвигом, соответственно на $-W/2$ и на $+W/2$. Следовательно плотность состояний отлична от нуля только в интервале $-\varepsilon_{\text{max}} < \varepsilon < \varepsilon_{\text{max}}$, где

$$\varepsilon_{\text{max}} = 2dt + W/2, \quad (102)$$

т.е., хвост плотности состояний простирается в запрещенную зону только на конечную глубину, равную $W/2$. При этом $\nu(E)$ должна быстро обращаться в нуль при приближении E к граничным значениям $\pm\varepsilon_{\text{max}}$. В данном разделе мы исследуем закон, по которому происходит это затухание.

8.1 Применение метода оптимальной флуктуации: качественные оценки

Итак, наша задача – оценить $\nu(E)$ при $E = -\varepsilon_{\max} + \delta E$, $\delta E \ll \min\{t, W\}$. Понятно, что конфигурации $\mathcal{C}$, в которых спектр включает в себя точку E , должны быть в некотором смысле близки к конфигурации $\mathcal{C}_-$. Эта “близость”, однако, может быть обеспечена только в некоторой ограниченной области пространства, более того, даже в этой ограниченной области близость может быть только относительной.

За счет каких эффектов энергия $E_0(\mathcal{C})$ основного состояния, отвечающего конфигурации $\mathcal{C}$, оказывается выше, чем $\varepsilon_{\max}$? Таких эффектов два:

1. Мы не можем потребовать, чтобы на дне ямы все ϵ_i были точно равны $-W/2$ (вероятность такого события равна нулю), и должны оставить для них возможность флуктуировать в некотором интервале между $-W/2$ и $-W/2 + \Delta\epsilon_i$. За счет этих “остаточных флуктуаций” энергия основного состояния электрона будет поднята на величину $\Delta E_0^{(\text{fluct})} \sim \langle \Delta\epsilon_i \rangle$ (где усреднение проводится, строго говоря, с весом, равным квадрату волновой функции основного состояния). Заметим, что вероятность того, что значение ϵ_i попадет в предписанный интервал, есть $w_i \sim \Delta\epsilon_i/W$.
2. Мы не можем потребовать, чтобы флуктуации были ограничены во всей системе (вероятность такого события $P = \prod_i w_i$ была бы равна нулю) и должны довольствоваться тем, что ограничение действует в некотором конечном объеме $\mathcal{V} \sim R^d$. При $\delta \ll \min\{t, W\}$ мы ожидаем, что этот объем будет велик: $R \gg a_0$ – постоянной решетки, поэтому в гамильтониане электрона главную роль будут играть малые импульсы $k \sim 1/R$ и мы можем воспользоваться методом эффективной массы: $\hat{H} \approx -\varepsilon_{\max} + k^2/2m$, где $m = 1/2t$. С другой стороны, мы знаем, что частица с массой m , будучи заперта в объеме с линейными размерами $\sim R$, приобретает положительную кинетическую энергию $\Delta E_0^{(\text{loc})} \sim 1/mR^2$.

В духе метода оптимальной флуктуации, нужно определить, какой набор $\Delta\epsilon_i$ нам следует взять, если мы хотим

- Чтобы $S = -\ln P \sim \sum_i \ln(W/\Delta\epsilon_i)$ было минимально
- Чтобы энергия основного состояния $\Delta E_0 \approx \Delta E_0^{(\text{fluct})} + \Delta E_0^{(\text{loc})}$, соответствующая конфигурации $\mathcal{C}$ не превышала значения δ .

Если аппроксимировать оптимальную флуктуацию, считая, что

$$\Delta\epsilon_i = \begin{cases} \Delta\epsilon, & \text{внутри области } \mathcal{V}, \\ W & \text{(т.е., ограничений нет), вне области } \mathcal{V}. \end{cases} \quad (103)$$

то мы получим, что

$$S \sim \frac{R^d}{v_0} \ln(W/\Delta\epsilon), \quad (104)$$

где v_0 – объем в расчете на один узел решетки. С другой стороны, условие $\Delta E_0^{(\text{fluct})} + \Delta E_0^{(\text{loc})} \lesssim \delta E$ принимает вид

$$\Delta\epsilon \lesssim \delta, \quad R \gtrsim (t/\delta E)^{1/2}, \quad (105)$$

так что экстремум “действия” (104) достигается на краю области (105). В результате, мы приходим к следующей оценке для плотности состояний:

$$\nu(-\varepsilon_{\max} + \delta E) \propto P \propto e^{-S_{\min}}, \quad S_{\min} = A_d \left(\frac{t}{\delta E} \right)^{d/2} \ln(B_d W / \delta E), \quad (106)$$

где A_d, B_d – зависящие от размерности пространства d численные константы, для определения которых необходим более точный расчет, проведенный в следующем разделе.

8.2 Формулировка и решение вариационной задачи

Для определения констант A, B нам нужно, во-первых, уточнить вид вероятностных множителей w_i . Для этого заметим, что, согласно результатам предыдущего раздела, волновая функция электрона в оптимальной флуктуации имеет большой пространственный масштаб $R \gg a_0$. Это означает, что пространственные флуктуации ϵ_i с масштабами $\ll R$ эффективно высредняются и электрон чувствует только плавную часть потенциальной энергии

$$\bar{V}(\mathbf{r}) \equiv \langle \epsilon_i \rangle_{\Delta\mathcal{V}(\mathbf{r})} + \frac{W}{2}, \quad (107)$$

где усреднение происходит по некоторому объему $\Delta\mathcal{V}(\mathbf{r})$ центрированному в точке $\mathbf{r}$. Мы предполагаем $\Delta\mathcal{V}$ малым по сравнению с $\mathcal{V}$, но содержащим большое число узлов $N = \Delta\mathcal{V}/v_0 \gg 1$. Определим фазовый объем конфигураций, обеспечивающих фиксированное значение $\bar{V}(\mathbf{r})$. Это

удобно сделать с помощью преобразования Фурье (см. задачу 8.3.1). В результате получаем:

$$w(\bar{V}) \equiv \prod_{i \in \Delta \mathcal{V}} \int_{-W/2}^{W/2} \frac{d\epsilon_i}{W} \delta \left(\bar{V} - \frac{W}{2} - \frac{1}{N} \sum_{i \in \Delta \mathcal{V}} \epsilon_i \right) \propto e^{-\Delta S}, \quad (108)$$

$$\Delta S = N \ln \left(\frac{W}{e\bar{V}} \right) \equiv \left(\frac{\Delta \mathcal{V}}{v_0} \right) \ln \left(\frac{W}{e\bar{V}} \right). \quad (109)$$

Таким образом, реализации определенного профиля “огрубленного потенциала” $\bar{V}(\mathbf{r})$ соответствует вероятность

$$P\{\bar{V}(\mathbf{r})\} = A e^{-S\{\bar{V}(\mathbf{r})\}}, \quad S\{\bar{V}(\mathbf{r})\} = \int \frac{d^d \mathbf{r}}{v_0} \ln(W/\bar{V}(\mathbf{r})), \quad (110)$$

где A – некоторый нормировочный множитель, несущественный для дальнейшего. Для его вычисления необходимо было бы знать точное выражение для $S\{\bar{V}(\mathbf{r})\}$ в области $\bar{V} \sim W$, где формула (110) не работает, так как при выводе мы предполагали, что везде в существенной области $\bar{V} < W/2$.

Далее можно ввести волновую функцию основного состояния $\psi(\mathbf{r})$ и построить вариационную задачу в полной аналогии с тем, как это делалось в гауссовом случае. При этом вместо уравнения (55) мы получим

$$\frac{1}{V(\mathbf{r})} \approx \max\{-\lambda|\psi(\mathbf{r})|^2, 1/W\}, \quad (111)$$

а вместо (57)

$$\left\{ -\frac{\nabla^2}{2m} - \max \left\{ \frac{1}{\lambda|\psi(\mathbf{r})|^2}, W \right\} - E \right\} \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (112)$$

8.2.1 Обоснование применимости теории возмущений

Решение нелинейного уравнения Шредингера (112) оказывается возможным благодаря тому, что потенциальную энергию в области ямы достаточно учитывать по теории возмущений. Можно было бы просто постулировать это утверждение, провести вычисления, и затем убедиться в правильности сделанного предположения.

Однако мне кажется поучительным привести соображения, наводящие на эту идею.

Профиль потенциальной энергии в оптимальной флуктуации определяет оба фактора в действии (104): как стоящий перед логарифмом

множитель $A \sim R^d/v_0$, так и выражение $B \sim W/\delta E$ под знаком логарифма. Вместе с тем, первый фактор гораздо важнее второго. Действительно, предположим, что $V(\mathbf{r}) \sim \delta E$ и сделаем преобразование $V(\mathbf{r}) \rightarrow V(\mathbf{r})(1 - \eta)$, где $0 < \eta \ll 1$ это приведет к замене $A \rightarrow A - \delta A$, $B \rightarrow B + \delta B$, где $\delta A/A = c_A \eta$ и $\delta B/B = c_B \eta$ с положительными константами $c_A, c_B \sim 1$. Подставляя в выражение $S = A \ln B$, найдем

$$S \rightarrow S(1 - c_A \eta)(1 + c_B \eta / \ln B) \approx S[1 - c_S \eta], \quad c_S = c_A - \frac{c_B}{\ln B} > 0 \quad (113)$$

так что потенциал $V(\mathbf{r})$ всегда выгодно понижать, по крайней мере, до тех пор, пока не станет $V(\mathbf{r}) \ll \delta E$ и не нарушатся условия вывода соотношения (113). Отсюда мы можем сделать вывод, что оптимальной флуктуации отвечает как раз $V(\mathbf{r}) \ll \delta E$, и можно воспользоваться теорией возмущения.

8.2.2 Нулевое приближение: главная экспоненциальная зависимость

В нулевом приближении

$$V(\mathbf{r}) = \frac{W}{2} \theta(r - R_d/k_0), \quad \psi(r) = k_0^{d/2} \psi_0(k_0 r), \quad \frac{k_0^2}{2m} = \delta E, \quad (114)$$

где

$$\psi_0(x) = \begin{cases} \sqrt{2/\pi} \cos x, & (d=1), \\ f_0 J_0(x), & (d=2), \\ \frac{1}{\sqrt{(2\pi^2)}} \frac{\sin x}{x}, & (d=3) \end{cases} \quad R_d = \begin{cases} \pi/2, & (d=1), \\ b_0, & (d=2), \\ \pi, & (d=3) \end{cases} \quad (115)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя нулевого порядка, b_0 – положение ее первого нуля $J_0(b_0) = 0$, а $f_0 = \left[2\pi \int_0^{b_0} J_0^2(x) x dx \right]^{-1/2}$.

Для определения главного множителя A в формуле (106) нулевого приближения уже оказывается достаточно,

$$A_d = \begin{cases} 2R_1 = \pi, & (d=1), \\ \pi R_2^2 = \pi b_0^2, & (d=2), \\ 4\pi/3 R_3^3 = 4\pi^4/3, & (d=3) \end{cases} \quad (116)$$

есть ни что иное, как объем d -мерного шара с радиусом R_d .

8.2.3 Первое приближение: Определение подлогарифмического множителя

Результат (122) определяет константу A_d в формуле (106), т.е., дает ответ в главном логарифмическом приближении. Для определения подлогарифмического множителя B нужно следующее, первое приближение.

В первом приближении по усредненному потенциалу $\bar{V}$ мы получаем

$$\frac{k^2}{2m} + \int \psi_0^2(x) \bar{V}(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} = \frac{k_0^2}{2m} = \delta E, \quad (117)$$

откуда следует связь между поправкой к величине k и потенциалом $\bar{V}$:

$$\delta k \equiv k - k_0 = -\frac{m}{k_0} \int \psi_0^2(x) \bar{V}(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x}. \quad (118)$$

Итак, в первом приближении нам нужно определить $\bar{V}(\mathbf{r})$ из условия минимума действия (110) при дополнительном условии (117). Для этого сконструируем

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\{\bar{V}\}, k, \lambda) &= S + \lambda \left\{ \frac{k^2}{2m} + \int \psi_0^2(x) \bar{V}(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} \right\} = \\ &= \int \frac{d^d \mathbf{x}}{v_0 k^d} \ln(W/e \bar{V}(\mathbf{x})) + \lambda \left\{ \frac{k^2}{2m} + \int \psi_0^2(x) \bar{V}(\mathbf{x}) d^d \mathbf{x} \right\}. \end{aligned} \quad (119)$$

Накладывая условие $\delta \tilde{S} / \delta \bar{V} = 0$, мы получим

$$-\frac{1}{v_0 k^d \bar{V}(\mathbf{x})} + \lambda \psi_0^2(x) = 0, \quad (120)$$

и, исключая $\bar{V}$, мы приходим к

$$\begin{aligned} \tilde{S}(k, \lambda) &= \int \frac{d^d \mathbf{x}}{v_0 k^d} \ln[(W/e) \lambda \psi_0^2(x) v_0 k^d] + \lambda \left\{ \frac{k^2}{2m} + \int \frac{d^d \mathbf{x}}{v_0 k^d} \lambda \right\} = \\ &= \frac{\mathcal{V}_d}{v_0 k^d} \ln[(W/e) \lambda v_0 k^d] + \int \frac{d^d \mathbf{x}}{v_0 k^d} \ln[\psi_0^2(x)] + \frac{k^2 \lambda}{2m} + \frac{\mathcal{V}_d}{v_0 k^d} = \\ &= \frac{\mathcal{V}_d}{v_0 k^d} \ln[W \lambda v_0 k^d] + \int \frac{d^d \mathbf{x}}{v_0 k^d} \ln[\psi_0^2(x)] + \frac{k^2 \lambda}{2m} = \\ &= \frac{\mathcal{V}_d}{v_0 k^d} \ln[W \beta_d \lambda v_0 k^d] + \frac{k^2 \lambda}{2m}, \end{aligned} \quad (121)$$

где $\mathcal{V}_d$ – объем d -мерного шара с радиусом R_d :

$$\mathcal{V}_d = \begin{cases} 2R_1 = \pi, & (d = 1), \\ \pi R_2^2 = \pi b_0^2, & (d = 2), \\ 4\pi/3 R_3^3 = 4\pi^4/3, & (d = 3), \end{cases} \quad (122)$$

и

$$e^{\beta_d} = \int \frac{d^d \mathbf{x}}{\mathcal{V}_d} \ln[\psi_0^2(x)] = \begin{cases} , & (d=1), \\ , & (d=2), \\ , & (d=3). \end{cases} \quad (123)$$

Дифференцируя (121) по k , приходим к системе уравнений для определения параметров k и λ :

$$-\frac{d\mathcal{V}_d}{v_0 k^{d+1}} \ln[W(\beta_d/e)\lambda v_0 k^d] + \frac{k\lambda}{m} = 0, \quad (124)$$

$$\frac{k^2}{2m} + \frac{\mathcal{V}_d}{\lambda v_0 k^d} = \delta E, \quad (125)$$

$$-\frac{\nabla^2 \psi(\mathbf{r})}{2m} + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) - \delta E\psi(\mathbf{r}) = 0, \quad (126)$$

$$\frac{1}{V(\mathbf{r})} = \min \{ -\lambda|\psi(\mathbf{r})|^2, W/2 \}. \quad (127)$$

$$\int d^d \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 = 1. \quad (128)$$

Делая, как и ранее, масштабное преобразование $\mathbf{r} \rightarrow a\mathbf{x}$, $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow a^{-d/2}\varphi(\mathbf{x})$, где $a = (m\delta E)^{-1/2}$, мы приходим опять к универсальному (но другому, не совпадающему с (62)!) нелинейному уравнению Шредингера

$$\left(-\frac{\nabla_{\mathbf{x}}^2}{2} - 1 + \xi \begin{cases} 1, & \varphi < \varphi_0, \\ (\varphi_0/\varphi(\mathbf{x}))^2, & \varphi > \varphi_0. \end{cases} \right) \varphi(\mathbf{x}) = 0, \quad (129)$$

$$\int d^d \mathbf{x} |\varphi(\mathbf{x})|^2 = 1, \quad \Lambda = -\frac{ma^{d+2}}{\lambda}, \quad \xi \equiv \frac{W}{2\delta E} \gg 1, \quad \varphi_0 = (\Lambda/\xi)^{1/2}. \quad (130)$$

8.3 Задачи

8.3.1 Процедура огрубления

Выведите формулу (110) для функции распределения “огрубленного потенциала”

8.3.2 Подлогарифмический множитель в одномерном случае

В одномерном случае выведенное в разделе 8.2.3 уравнение (129) может быть решено аналитически. Найдите это решение и выпишите подлогарифмический множитель в явном виде.

9 Модель Лифшица

Это простейшая из моделей, описывающих систему примесных состояний в твердом теле (ближе всего здесь подходит полупроводник). Пусть в случайных точках пространства $\mathbf{r}_i$ расположены узлы со средней концентрацией n (без каких бы то ни было корреляций). Квантовая частица может переходить с узла на узел; ее движение описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \sum_{i \neq j} t_{ij} a_i^\dagger a_j, \quad t_{ij} = t_0 \exp\{-|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|/a\} \quad (131)$$

В этой задаче есть всего один безразмерный параметр na^3 . Можно различать случай высокой плотности $na^3 \gg 1$ и низкой плотности $na^3 \ll 1$

9.1 Случай высокой плотности примесей

При $na^3 \gg 1$ подавляющее большинство собственных состояний гамильтониана (131) делокализовано и мало отличается от плоских волн. Действительно, в этом случае применимо “приближение среднего поля”: на длине волны частицы уместается большое количество узлов, поэтому суммирование по узлам в гамильтониане (131) можно заменить на интегрирование по пространству. В результате уравнение Шредингера приобретает вид

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = nt_0 \int d^d \mathbf{r}' \exp\{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/a\} \psi(\mathbf{r}') = E\psi(\mathbf{r}), \quad (132)$$

и тривиально решается с помощью преобразования Фурье:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad E(\mathbf{k}) = nt_0 \int d^d \mathbf{r} \exp\{-|\mathbf{r}|/a + i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})\}. \quad (133)$$

Например, в трехмерном случае, получаем

$$E(\mathbf{k}) = \frac{8\pi(na^3)t_0}{[1 + (ka)^2]^2}, \quad (134)$$

и при $ka \ll 1$ $E(\mathbf{k}) \approx E(0) - k^2/2m^*$, где

$$E(0) = 8\pi(na^3)t_0 \quad m^* = \frac{1}{32(na^3)t_0a^2}, \quad (135)$$

так что при $t_0 < 0$ низкоэнергетические возбуждения имеют электронный, а при $t_0 > 0$ – дырочный характер. Учет поправок к приближению среднего поля (т.е., флуктуаций плотности узлов) приводит к слабому рассеянию плоских волн (см. задачу 9.2.1), в результате чего формируется конечная длина свободного пробега l и на расстояниях $r \gg l$ движение квазичастиц приобретает диффузионный характер.

Итак, при высокой плотности примесей система обладает свойствами хорошего проводника: электроны движутся почти свободно, изредка рассеиваясь на флуктуациях плотности примесей.

9.2 Задачи

9.2.1 Длина свободного пробега электронов при высокой плотности примесей

При написании формулы (132) мы предполагали плотность примесей n постоянной в пространстве. Если учесть пространственные флуктуации $n(\mathbf{r})$, то состояния электрона с определенным импульсом приобретают конечное время жизни $\tau(E)$. Определите $\tau(E)$ и соответствующую длину свободного пробега $l(E)$. Для описания флуктуаций плотности воспользуйтесь формулой

$$\langle \xi(\mathbf{r})\xi(\mathbf{r}') \rangle = \bar{n}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \xi(\mathbf{r}) \equiv n(\mathbf{r}) - \bar{n}. \quad (136)$$

Обоснуйте возможность применения этой формулы в данной задаче.

9.3 Случай низкой плотности примесей

Гораздо интереснее “диэлектрический случай” $na^3 \ll 1$, когда волновые функции имеют ярко выраженный локализованный характер.

9.3.1 Классификация состояний

Для того, чтобы выяснить природу спектра и собственных состояний в этом случае, удобно проделать следующую процедуру: Для каждого узла i в системе найдем ближайший к нему узел $j = N(i)$ и проведем стрелку из $N(i)$ в i . При этом все множество узлов распадется на не связанные между собой конечные “квазидревесные” графы (см. рис.2).

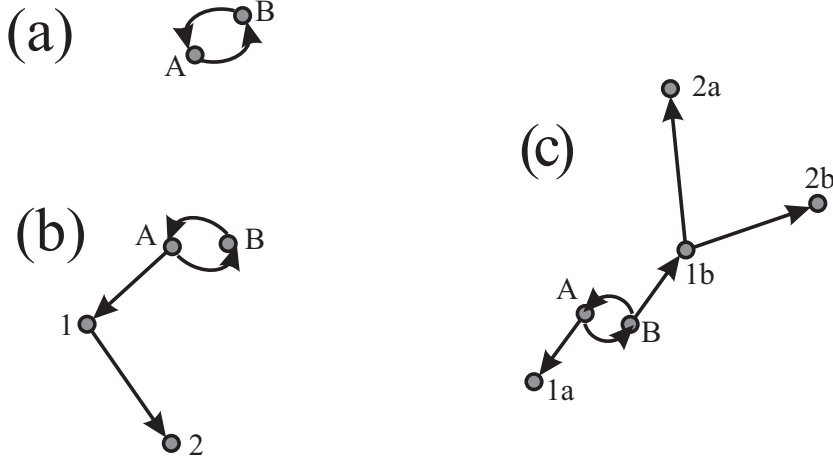


Рис. 2: (a): Минимальный граф, состоящий только из двух спаренных узлов A и B . (b): Граф с одним потомком первого порядка и одним – второго. (c): Граф с двумя потомками первого порядка и двумя – второго.

Каждый такой граф содержит одну центральную петлю, сосредоточенную на паре резонансных узлов A, B , для которых $N(A) = B$, $N(B) = A$ и, возможно, некоторое количество деревьев, растущих из узла A или из узла B . Порядком вершины, принадлежащей дереву, мы будем называть количество стрелок, которые нужно пройти, чтобы добраться до нее от центральной петли. Заметим еще, что если идти по графу вдоль направления стрелок, то длины связей будут все время увеличиваться.

Для типичного графа длины всех его ребер имеют порядок среднего расстояния между узлами

$$\bar{r} = (4\pi n/3)^{-1/3} \quad (137)$$

Как правило, расстояние $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{N(i)}|$ от некоторого узла i , до ближайшего к нему $N(i)$ отличается от расстояния $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{N_1(i)}|$ до следующего по близости узла $N_1(i)$ также на величину $\sim \bar{r} \gg a$, так что соответствующие им величины $t_{iN(i)}$ и $t_{iN_1(i)}$ отличаются экспоненциально сильно, и поэтому прыжками на ближайшие узлы можно пренебречь. Исключение составляют аномальные ситуации, когда $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{N_1(i)}| - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{N(i)}| \lesssim a$ и иерархическая древесная структура графов нарушается. При $na^3 \ll 1$ такие конфигурации встречаются очень редко, и пока мы не будем их учитывать.

С учетом всего сказанного, мы можем найти сдвиги уровней узлов, входящих в некоторый граф.

- Самый большой – резонансный – сдвиг испытывают уровни узлов, входящих в центральную петлю: они расщепляются в симметричный дублет, а соответствующие волновые функции гибридизуются

$$\varepsilon^{(\pm)} = \pm t_{AB} = \pm t_0 e^{-r_{AB}/a}, \quad \psi_{AB}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle + |B\rangle) \quad (138)$$

- Узлы, принадлежащие “деревьям” испытывают нерезонансный сдвиг, который можно вычислить во втором порядке теории возмущений. В частности, для узлов первого порядка

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{|\langle 1 | \hat{H} | \psi^{(+)} \rangle|^2}{-\varepsilon^{(+)}} + \frac{|\langle 1 | \hat{H} | \psi^{(-)} \rangle|^2}{-\varepsilon^{(-)}} = \\ &= t_0 \left\{ \frac{(e^{-r_{1A}/a} + e^{-r_{1B}/a})^2}{-2e^{-r_{AB}/a}} + \frac{(e^{-r_{1A}/a} - e^{-r_{1B}/a})^2}{2e^{-r_{AB}/a}} \right\} = \\ &= -2t_0 \exp\{-(r_{1A} + r_{1B} - r_{AB})/a\} \end{aligned} \quad (139)$$

- Еще легче вычислить нерезонансные сдвиги уровней для узлов второго и более высоких порядков:

$$\varepsilon_2 = \frac{|\langle 2 | \hat{H} | 1 \rangle|^2}{-\varepsilon_1} = \frac{t_{12}^2}{-\varepsilon_1}, \quad \varepsilon_{n+1} = \frac{t_{n+1n}^2}{-\varepsilon_n} \quad (140)$$

Отсюда, в частности, следует, что (при $t_0 > 0$) все $\varepsilon_n > 0$ для четных n и все $\varepsilon_n < 0$ для нечетных n (при $t_0 < 0$ ситуация обратная).

$$\varepsilon_n = (-1)^n t_0 e^{-s_n}, \quad s_n \approx \begin{cases} 2r_{nn-1}/a - s_{n-1} & (n > 1), \\ (r_{1A} + r_{1B} - r_{AB})/a & (n = 1). \end{cases} \quad (141)$$

Теперь мы можем исследовать плотность состояний в различных диапазонах энергии

9.3.2 Ближний хвост плотности состояний: $1 \ll \ln(t_0/|E|) \ll \bar{r}/a$

Уровни с такими энергиями в подавляющем большинстве случаев обеспечиваются за счет “умеренно близких пар” AB , для которых $|E| = t_0 e^{-r_{AB}/a}$. Поскольку $r_{AB} = a \ln(t_0/|E|) \ll \bar{r}$, расстояние между компонентами такой пары много меньше типичного, и они наверняка образуют центральную петлю. Плотность таких пар

$$\nu(E) = \frac{n^2}{2} 4\pi r_{AB}^2 (\xi^{(\pm)}) \frac{dr_{AB}(E)}{dE} = 2\pi n (na^3) \frac{[\ln(t_0/|E|)]^2}{|E|} \quad (142)$$

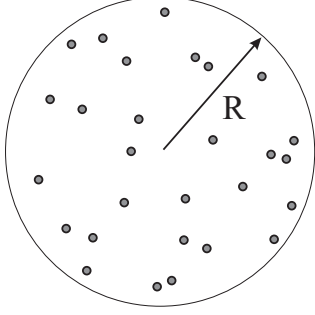


Рис. 3: Флуктуация, отвечающая уровням энергии $E \gg t_0$: в области радиуса $R \lesssim a$ случайно оказалось много (на рисунке $N = 28$) узлов.

Отметим, что плотность состояний в этой области энергий симметрична: $\nu(E) = \nu(-E)$. Эта симметрия связана с симметричностью резонансного расщепления уровней.

9.3.3 Дальний хвост плотности состояний: $E \gg t_0$.

Здесь применим метод оптимальной флуктуации. Уровень с такой большой энергией можно обеспечить только если набить много ($N \gg 1$) узлов в ограниченное пространство размером $R \lesssim a$ (см. рис. 3).

При этом максимальная энергия

$$E_{\max} = (N - 1)t_0 \quad (143)$$

электрона на таком комплексе отвечает полносимметричной волновой функции, равномерно распределенной по всем N узлам. Отсюда легко найти $N_E = E/t_0 + 1$, необходимое для того, чтобы обеспечить заданную энергию $E \gg t_0$. При $N \gg 1$ вероятность такой флуктуации

$$P_E \approx \frac{(4\pi n R^3/3)^{N_E}}{N_E!} \approx (C n a^3/N_E)^{N_E} \quad (144)$$

где $C \sim 1$ – некоторый численный фактор, который мы здесь не будем вычислять. В экспоненциальном приближении мы получаем окончательное выражение для плотности состояний в этом энергетическом интервале:

$$\nu(E) \sim \frac{1}{E} \exp \left\{ -\frac{E}{t_0} \ln \left[C \frac{t_0}{E(na^3)} \right] \right\} \quad (145)$$

отметим, что в пределе $E \gg t_0$ численный множитель (единица) перед логарифмом в показателе экспоненты выражения (145) определен корректно. Это связано с тем, что, по соображениям, которые мы приводили

в разделе 8.2, пространственный размер R_{opt} оптимальной флуктуации выгодно уменьшать до значений $R_{\text{opt}} \ll a$, так что формула (143), справедливая при $R_{\text{opt}} \sim a$ только по порядку величины, становится точной.

9.3.4 Большие отрицательные энергии $E < -t_0$

Покажем, что спектр гамильтониана (131) при $t_0 > 0$ ограничен снизу (а при $t_0 < 0$ – сверху).

Ясно, что при типичных значениях $r_{ij} \sim \bar{r}$ собственные значения гамильтониана экспоненциально малы. Поэтому больших по абсолютной величине значений энергий можно ожидать только от конфигураций, в которых некоторое количество примесей образуют плотный кластер с $r_{ij} \ll \bar{r}$. В пределе $r_{ij} \rightarrow 0$ спектр такого кластера, содержащего N частиц, состоит из значения $E^{(+)} = (N - 1)t_0$, отвечающего полносимметричной волновой функции, и $N - 1$ -кратно вырожденного уровня $E^{(-)} = -t_0$. Естественно ожидать, что учет конечности плотности кластера (конечных, но малых значений r_{ij}) может привести только к повышению минимальной энергии $E^{(-)}$. Доказательство этого утверждения составляет предмет задачи 9.4.1.

Итак, состояния с энергиями $E = -t_0 + \delta E$, чуть большими, чем $-t_0$ (т.е., $0 < \delta E \ll t_0$) отвечают флуктуациям, в которых некоторое количество $N \geq 2$ примесей оказываются очень близко друг к другу. Очевидно, что наиболее вероятная из таких флуктуаций содержит минимально возможное число примесей, т.е. $N = 2$. Тогда легко получить, что расстояние между этими примесями r_{AB} связано с величиной δE соотношением

$$r_{AB}(\delta E) = a\delta E/t_0 \quad (146)$$

Тогда, действуя аналогично выводу формулы (142)

$$\nu(E) = \frac{n^2}{2} 4\pi r_{AB}^2(\delta E) \frac{dr_{AB}(\delta E)}{d\delta E} = 2\pi n(na^3) \frac{\delta E^2}{t_0} \quad (147)$$

Мы заключаем, что плотность состояний при $E < -t_0$ тождественно равна нулю, а при приближении к границе $E = -t_0$ со стороны бóльших энергий обращается в нуль по квадратичному закону $\nu \propto (E + t_0)^2$. Заметим еще, что формула (147) на самом деле тождественна формуле (142) при $E < 0$. Таким образом, хвост плотности состояний при $E < 0$ во всей области $\ln(t_0/|E|) \ll \bar{r}/a$ описывается единой простой формулой

$$\nu(E) = 2\pi n(na^3) \frac{[\ln(t_0/|E|)]^2}{|E|} \theta(E + t_0). \quad (148)$$

9.3.5 Область провала: $\ln(t_0/|E|) \gg \bar{r}/a$

Уровни с такими маленькими энергиями, как правило, должны возникать на нерезонансных узлах, находящихся на узлах самого высокого порядка n , возможного для данного дерева (т.е., на концах его древесных ветвей), причем n должно быть четным, если $E > 0$, и нечетным, если $E < 0$. Более того, последний сучок, ведущий к такому узлу, должен быть аномально длинным:

$$r_{nn-1} \approx \frac{a}{2} \left[\ln \frac{t_0}{|E|} + s_{n-1} \right] \quad (149)$$

Это означает, что вокруг n -го узла должна быть “полость” радиуса r_{nn-1} , в которой нет ни одного узла (см. рис.4). Вероятность образования такой аномально большой полости

$$P_n(E) \sim \exp\{4\pi n r_{nn-1}^3/3\} = \left\langle \exp \left\{ \frac{4\pi n}{3} \left(\frac{a}{2} \left[\ln \frac{t_0}{|E|} + s_{n-1} \right] \right)^3 \right\} \right\rangle_{s_{n-1}}. \quad (150)$$

Это выражение содержит усреднение по неизвестному параметру s_{n-1} , характеризующему начальные сучки дерева, предшествующие r_{nn-1} . В экспоненциальном приближении можем записать

$$\nu(E) \sim \exp \left\{ -(S_0 + S_1^{(\pm)} + \dots) \right\}, \quad S_0 = \frac{\pi(na^3)}{6} [\ln(t_0/|E|)]^3, \quad (151)$$

$$e^{-S_1^{(+)}} = \sum_{n-\text{even}} \left\langle \exp \left\{ -\frac{\pi(na^3)}{2} [\ln(t_0/|E|)]^2 s_{n-1} \right\} \right\rangle_{s_{n-1}}, \quad (152)$$

$$e^{-S_1^{(-)}} = \sum_{n-\text{odd}} \left\langle \exp \left\{ -\frac{\pi(na^3)}{2} [\ln(t_0/|E|)]^2 s_{n-1} \right\} \right\rangle_{s_{n-1}}. \quad (153)$$

Верхние индексы $(+)$ и $(-)$ относятся, соответственно, к случаям $E > 0$ и $E < 0$. В то время, как последний сучок в дереве имеет аномально большую длину, никаких условий на предшествующие сучки (если они есть) не накладывается, так что их типичные длины $\sim \bar{r}$. Поэтому усреднение по s_{n-1} и суммирование по n приводят к замене s_{n-1} на его характерное значение $\sim \bar{r}/a$:

$$s_{n-1} \rightarrow c^{(\pm)} \bar{r}/a, \quad (154)$$

причем численные константы $c^{(+)} \sim 1$ и $c^{(-)} \sim 1$ отличаются друг от друга. Действительно, в плотность состояний при $E > 0$ дают конфигурации с четными n , а при $E < 0$ – с нечетными, поэтому вероятности

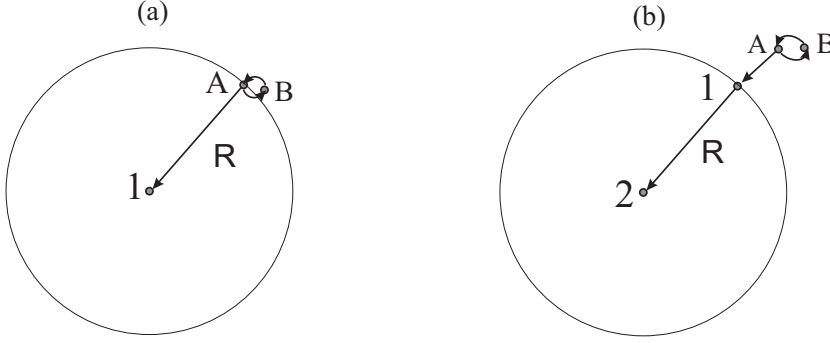


Рис. 4: Флуктуации, отвечающие уровням энергии $E \ll E_0^{(\pm)}$ в провале: Вокруг узла порядка n , лежащего на самом краю дерева, имеется аномально большая полость радиуса $R \gg \bar{r}$, в которой нет других узлов. (a): Случай $n = 1$ отвечает положительному сдвигу энергии $E > 0$, (b): Случай $n = 2$ отвечает отрицательному сдвигу энергии $E < 0$.

соответствующих флуктуаций, вообще говоря, различаются. Практическое определение констант $c^{(\pm)}$ (как и исследование статистики графов), скорее всего, возможно только путем численной симуляции.

Ведущее (имеющее порядок x^3 по большому параметру $x \equiv a \ln(t_0/|E|)/\bar{r} \gg 1$) слагаемое S_0 в показателе экспоненты симметрично относительно замены $E \rightarrow -E$. Этого, однако, нельзя сказать о следующем члене, S_1 который возникает при учете второго слагаемого в (149) и имеет порядок x^2 . Этот член пропорционален $c^{(\pm)}$, что должно приводить к экспоненциально сильной асимметрии плотности состояний.

Комбинируя S_0 и $S_1^{(\pm)}$, можно записать

$$\nu(E) \sim \exp \left\{ -\frac{\pi(na^3)}{6} [\ln(E_0^{(\pm)}/|E|)]^3 \right\}, \quad E_0^{(\pm)} = t_0 e^{-c^{(\pm)}\bar{r}/a}, \quad (155)$$

где $E_0^{(\pm)}$ примерно совпадают с положениями, соответственно, левого и правого максимумов плотности состояний.

9.3.6 Очень малые энергии

Когда радиус полости r_{nn-1} увеличивается, увеличивается также и среднее число узлов

$$\delta N \sim 4\pi r_{nn-1}^2 a \sim \pi(na^3) [\ln(E_0^{(\pm)}/|E|)]^2, \quad (156)$$

расположенных вблизи поверхности полости, на расстояниях $r = r_{nn-1} + \delta r$, где $\delta r \sim a$. Эти узлы – хотя и не являются ближайшими к интересующему нас узлу n – могут приводить к нерезонасному сдвигу узла n ,

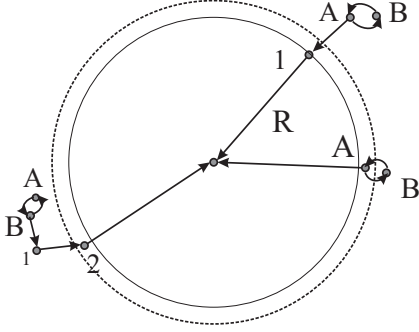


Рис. 5: Флуктуации, отвечающие самым маленьким энергиям: при большом радиусе полости $R \sim \bar{r}(\bar{r}/a)^{1/2}$, в слое толщиной $a \ll \bar{r}$ около ее поверхности с заметной вероятностью найдется больше одного узла. Все такие узлы дадут вклад в сдвиг энергии центрального узла и, если эти вклады имеют разные знаки (т.е., отвечают n различной четности), то возможна их взаимная компенсация, которая, как раз, и обеспечивает малость результирующего сдвига.

сравнимому со сдвигом, вызываемым ближайшим узлом. При

$$E \sim E_{\min} = E_0^{(\pm)} \exp\{-(\pi(na^3)^{-1/2})\} \quad (157)$$

когда δN становится порядка единицы, мы можем утверждать, что наш центральный узел, вероятнее всего, гибридизуется уже не с одним узлом, ближайшим к нему, а сразу с несколькими узлами (см. рис.5).

При этом вся описанная выше конструкция рушится. Можно показать, что, в результате при дальнейшем уменьшении $|E|$ плотность состояний перестает уменьшаться и стабилизируется на уровне

$$\nu(E \lesssim E_{\min}) \sim \exp\{-(na^3)^{-1/2}\}. \quad (158)$$

9.4 Задачи

9.4.1 Ограниченность спектра в модели Лифшица

Докажите, что все собственные значения E_λ гамильтониана (131) удовлетворяют условию $E_\lambda \geq -t_0$.

10 Локализационный переход

До сих пор мы исследовали только среднюю плотность состояний в различных моделях, эта величина, как мы убедились на примере модели

Ллойда, не чувствительна к переходу Андерсона, при котором волновая функция ψ_E при фиксированной энергии E меняет свой характер: из локализованной превращается в делокализованную. Одновременно с этим обращается в нуль остаточная проводимость (т.е., проводимость при $T = 0$) в системе невзаимодействующих электронов, уровень Ферми в которой совпадает с E . Заметим, что почувствовать этот переход можно и исследуя плотность состояний, но только не ее среднюю величину, а, скажем, коррелятор флуктуаций

$$K(E, \omega) = \left\langle \nu \left(E + \frac{\omega}{2} \right) \nu \left(E - \frac{\omega}{2} \right) \right\rangle - \left\langle \nu \left(E + \frac{\omega}{2} \right) \right\rangle \left\langle \nu \left(E - \frac{\omega}{2} \right) \right\rangle \quad (159)$$

Но начнем мы с интуитивного определения понятия локализованности и делокализованности.

10.1 Локализованные и делокализованные волновые функции: простейшие примеры и их обобщение.

В простых случаях нам интуитивно ясно, какие волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ называть локализованными, а какие – делокализованными. Например, плоская волна с энергией E $\psi_E(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, очевидно, делокализована: плотность электрона $|\psi(\mathbf{r})|^2 = V^{-1}$ равномерно распределена по всему объему V . Если мы немного возмутим плоскую волну, (скажем – заставив ее рассеиваться на редких примесях) можно ожидать, что плотность только чуть-чуть изменится вблизи примесей, в среднем оставшись примерно постоянной. Критерием слабости возмущения (и, одновременно, критерием квазиклассичности движения электрона) является условие

$$kl \gg 1, \quad (160)$$

где $k = (2mE)^{1/2}$ – импульс электрона, $l(E)$ – длина свободного пробега относительно рассеяния на примесях. На малых расстояниях $r \ll l$ электрон движется баллистически по прямой классической траектории, а на больших расстояниях $r \gg l$ классически диффундирует. При этом он все дальше и дальше удаляется от начальной точки своего движения: $\langle r(t)^2 \rangle = Dt$.

Если увеличивать число рассеивателей, то длина свободного пробега будет уменьшаться, и условие (160) рано или поздно нарушится. При этом теряет смысл и само понятие длины свободного пробега, хорошо определенное только в квазиклассическом случае. При этом можно ожидать, что при достаточно сильном беспорядке волновая функция

окончательно перестанет быть похожей на плоскую волну и станет локализованной.

Все сказанное действительно верно только в системах пространственной размерности $d > 2$; в одномерных и двумерных системах все состояния оказываются локализованными уже при сколь угодно малой концентрации примесей (т.е. при сколь угодно большой длине свободного пробега) и на достаточно больших расстояниях частица перестает диффундировать даже при выполненном условии (160).

Наоборот, состояние электрона, связанного на уединенной примеси $\psi(\mathbf{r}) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/a)$ – локализовано: плотность $|\psi(\mathbf{r})|^2$ экспоненциально убывает при удалении от точки $\mathbf{r}_0$, где расположена примесь. Если примесей много, но их концентрация n мала ($na^3 \ll 1$), то мы ожидаем, что локализованный характер волновых функций сохранится: несмотря на наличие гибридизации благодаря туннелированию электронов между примесями, каждая волновая функция будет в основном сосредоточена около одной какой-нибудь примеси (ну, или, в крайнем случае, поделена между двумя соседними примесями), а вероятность оказаться на всех остальных будет экспоненциально мала (см. Модель Лифшица). Разумеется, это верно только если примеси расположены случайно, а не в виде регулярной решетки: в последнем случае появятся узкие разрешенные зоны, внутри которых состояния будут де-локализованы наподобие плоских волн.

Если увеличивать параметр na^3 , то перекрытие волновых функций на различных примесях будет усиливаться, будет образовываться все больше “аномальных” волновых функций, сосредоточенных не на одной, не на двух, а на большом числе примесей. В какой-то момент возникнет волновая функция, распределенная по бесконечному числу примесей, произойдет делокализация.

10.2 Переход Андерсона и длина локализации.

Мы видим, что даже в простых предельных случаях учет беспорядка делает вопрос о локализованности волновых функций не вполне тривиальным. Тем более трудно ответить на этот вопрос в промежуточной области параметров, где делокализованные состояния превращаются в локализованные. Такое превращение происходит непрерывным образом, так что локализованные и делокализованные волновые функции вблизи локализационного перехода должны быть в каком-то смысле очень похожи друг на друга. Как это возможно?

Для начала отметим, что достичь локализационного перехода можно по-разному:

- Можно, не изменяя степени беспорядка W и других параметров системы, изменять энергию электрона E . Тогда переход произойдет при $E = E_m(W)$, где величина $E_m(W)$ называется краем подвижности (mobility edge).
- Можно, наоборот, изменять параметры, не меняя E . Тогда переход произойдет при $W = W_c(E)$.

Оказывается, что вблизи перехода в системе возникает новый большой пространственный масштаб – длина локализации ξ , которая расходится при приближении к переходу:

$$\xi(E, W) \propto \left| 1 - \frac{E}{E_m(W)} \right|^{-\nu} \sim \left| 1 - \frac{W}{W_c(E)} \right|^{-\nu}, \quad (161)$$

с универсальным критическим индексом ν . Зависимость (161) и численное значение ν были определены в многочисленных численных экспериментах. Например:

$$\nu_{d=3} \approx 1.58 \quad (162)$$

Длина ξ играет роль, похожую на роль корреляционной длины в теории перколяции: на масштабах $r \ll \xi$ волновые функции обладают фрактальными свойствами, на этих масштабах отличить локализованное состояние от делокализованного просто невозможно: в обоих случаях волновая функция состоит и нерегулярно чередующихся провалов и пиков разной величины, характеристики которых случайны и описываются универсальными степенными функциями распределения. Только на масштабах $r \gg \xi$ волновая функция, наконец, “делает свой выбор” по отношению к локализации. Если она делокализована, то флуктуации на таких больших масштабах самоусредняются и огрубленная (т.е., усредненная на масштабах $r \lesssim \xi$) плотность электрона $\langle |\psi(r)|^2 \rangle_\xi \approx \text{const}$ оказывается равномерно распределенной по всему пространству. Наоборот, если волновая функция локализованная, то на расстояниях $r \gg \xi$ мы замечаем, что огрубленная плотность электрона $\langle |\psi(r)|^2 \rangle_\xi \propto e^{-r/\xi}$ экспоненциально спадает.

Отметим здесь некоторую аналогию с теорией перколяции: локализованные функции аналогичны конечным кластерам, делокализованные – бесконечному.

10.3 Как отличить локализованную функцию от делокализованной в общем случае?

Попробуем придумать явный математический объект (это должен быть какой-то функционал от волновой функции $\psi(\mathbf{r})$), вычисляя который, мы будем, после усреднения по беспорядку, автоматически получать ответ на вопрос, локализовано ли типичное состояние при заданных значениях параметров. Конечно, хотелось бы, чтобы объект был попроще. Самое простое – это какая-нибудь билинейная комбинация из $\psi(\mathbf{r})$. Однако все такие билинейные комбинации выражаются через одночастичную функцию Грина системы $G_E^{R,A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Известно, что усредненная по беспорядку одночастичная функция Грина совершенно не чувствует локализационного перехода: например, в некоторых моделях удается точно найти усредненную плотность состояний

$$\nu(E) \equiv \mp \frac{1}{\pi V} \int d\mathbf{r} \operatorname{Im} \left\{ \langle G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \rangle \right\}, \quad (163)$$

$$G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\alpha} \frac{\psi_{\alpha}(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\alpha} \pm i0} \quad (164)$$

при произвольном уровне беспорядка, причем $\nu(E)$ оказывается абсолютно гладкой функцией как энергии E , так и величины беспорядка W во всем интервале их изменения. С другой стороны, как хорошо известно из качественных соображений и численных расчетов, для трехмерной системы на плоскости параметров E, W существует некоторая линия, разделяющая локализованные и делокализованные состояния. Значит, $\nu(E)$ не испытывает никаких особенностей при переходе через эту линию и не может служить индикатором локализации.

Таким индикатором может служить какая-нибудь биквадратная комбинация, например, остаточная (т.е., при $T = 0$) статическая проводимость системы σ . Действительно, σ обращается в нуль, если уровень Ферми лежит в области локализованных состояний. Однако простейшим объектом, чувствующим локализацию, по-видимому, является так называемый ‘Inverse participation ratio’

$$P_2 = \int |\psi_E(\mathbf{r})|^4 d^d \mathbf{r} \quad (165)$$

Рассмотрим его среднее значение для большой, но конечной системы размером L . Глубоко в локализованной области, когда волновая функция сосредоточена в компактной области размером $a \ll L$, очевидно $\langle P_2(E, L) \rangle \sim a^{-d}$ и не зависит от L . Глубоко в металлической области, когда волновая функция мало отличается от плоской волны,

$\langle P_2(E, L) \rangle \sim L^{-d}$ и обращается в нуль при $L \rightarrow \infty$. Таким образом, кажется разумным положить обращение в нуль величины $\lim_{L \rightarrow \infty} \langle P_2(E, L) \rangle$ в качестве критерия делокализации. Интересно проследить за поведением $\langle P_2(E, L) \rangle$ вблизи порога локализации, где ξ велико:

$$\langle P_2(E, L) \rangle \sim \frac{1}{a_0^d} \begin{cases} (\xi/a_0)^{d-D_2} (L/a_0)^{-d}, & L \gg \xi, \quad \text{metal} \\ (L/a_0)^{-D_2}, & L \ll \xi, \quad \text{critical} \\ (\xi/a_0)^{-D_2}, & L \gg \xi, \quad \text{insulator} \end{cases} \quad (166)$$

где a_0 – “ультрафиолетовый” (минимальный) пространственный масштаб. Например, если мы рассматриваем систему на решетке, то a_0 – постоянная решетки. Наиболее нетривиальной частью формулы (166) представляется необычная степенная зависимость в критической области: величина фрактальной размерности $D_2 < d$. Например,

$$D_2 \approx \begin{cases} 1.3 < 3, & d = 3, \\ 0.9 < 4, & d = 4. \end{cases} \quad (167)$$

Этот факт подтверждает наличие рыхлой фрактальной структуры волновых функций на малых масштабах, уже упоминавшейся нами выше, причем “степень фрактальности” (характеризующаяся отличием D_2 от d) возрастает с ростом размерности пространства.

Кроме величины P_2 представляют интерес и другие корреляторы: например, двухточечный коррелятор

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \langle |\psi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}')|^2 \rangle - L^{-2d} \sim \quad (168) \\ &\sim \begin{cases} L^{-2d}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi)^{-(d-D_2)}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \xi \ll L, \quad \text{metal} \\ L^{-2d}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/L)^{-(d-D_2)}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll L \ll \xi, \quad \text{critical} \\ (\xi/L)^{-(d-D_2)} \exp\{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi\}, & \xi \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll L, \quad \text{insulator} \end{cases} \quad (169) \end{aligned}$$

Можно найти и двухточечный коррелятор для двух разных волновых функций: $K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', E_i - E_j) = \langle |\psi_i(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r}')|^2 \rangle - L^{-2d}$, а также и многоточечные корреляторы, но мы не будем здесь углубляться в эти вопросы.

10.4 Фазовая диаграмма

Ансамбль гамильтонианов (2) характеризуется тремя величинами размерности энергии: E, t, W и, соответственно, двумя глобальными безразмерными параметрами: W/t и E/t . Важно понимать, что при любых значениях параметра W/t в ансамбле гамильтонианов найдутся как такие, при которых состояние с данной энергией E будет локализовано, так

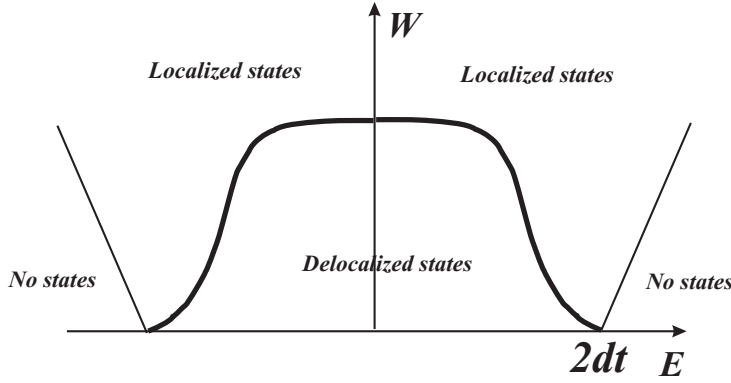


Рис. 6: Области локализованных и делокализованных состояний на плоскости $E - W$

и такие, при которых оно будет делокализовано. В термодинамическом пределе (когда число узлов решетки N стремится к бесконечности) в подавляющем большинстве случаев будет осуществляться только одна из этих двух возможностей, так что можно говорить либо о локализации, либо о делокализации с вероятностью единица. При этом необходимый размер системы оказывается тем больше, чем ближе к порогу локализации находятся глобальные параметры.

На рисунке 6 показана линия, разделяющая области локализованных и делокализованных состояний для модели Андерсона на d -мерной гиперкубической решетке с распределением (3). Кроме того, выделены области, где состояний вообще нет (объясните сами, в качестве задачи).

10.4.1 Качественное описание перехода Андерсона.

Мы приведем здесь оценку критического беспорядка W_c , такого, что при $W > W_c$ все состояния в системе локализованы. Эта оценка основана на идеях и результатах теории перколяции.

Ясно, что при увеличении W последним локализуется состояние с $E = 0$, в центре зоны. Поэтому W_c отвечает как раз локализации состояния с $E = 0$.

Возьмем какие-нибудь два соседних узла в решетке i и j с энергиями E_i и E_j . Понятно, что, если $|E_i - E_j| \ll t$, волновые функции будут сильно обобществлены между этими двумя узлами: $\psi_{1,2} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_i \pm \psi_j)$. Наоборот, при $|E_i - E_j| \gg t$ узлы практически не гибридизуются: $\psi_{1,2} \approx \psi_{i,j}$.

Рассмотрим теперь волновую функцию с энергией $E = 0$. Наше приближение будет состоять в том, что мы полностью пренебрежем вкладом в эту функцию “нерезонансных” узлов с $|E_i| > \Delta/2$ (где $\Delta = ct$, конкрет-

Пространственная размерность	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$
$4/x_{\text{perc}}$ (sites)	6.8	12.9	20	28.6
W_c/t	6.1	14.4	25	36

ный выбор величины c – наиболее скользкое место, см. ниже). Наоборот, гибридизацию “резонансных” узлов с $|E_i| > \Delta/2$ будем считать очень сильной. Все множество резонансных узлов при этом разобьется на кластеры ближайших соседей, в точности так же, как в задаче о перколяции. Очевидно, конечные кластеры могут нести на себе только локализованные волновые функции, причем соответствующие собственные энергии будут дискретны и, вообще говоря, не равны нулю. Делокализованное состояние с $E = 0$ может жить только на бесконечном кластере, поэтому в качестве грубой оценки момента локализации можно рассмотреть тот момент, когда в системе возникает бесконечный кластер, т.е., когда $\Delta/W = x_{\text{perc}}$ – порогу перколяции в задаче узлов для данной решетки.

Для выбора численного коэффициента c пользуются следующими сомнительными рассуждениями: вблизи порога перколяции локальная структура бесконечного кластера интуитивно представляется состоящей из довольно длинных одномерных нитей (на самом деле это не совсем верно). Ширина зоны в такой гипотетической одномерной структуре $\Delta_{\text{band}} = 4t$. Отождествляя (почему?) величину Δ с величиной Δ_{band} , мы приходим к условию

$$W_c/t = 4/x_{\text{perc}} \quad (170)$$

Несмотря на очевидную шаткость приведенных выше количественных оценок, формула (170) дает недурное согласие с численным экспериментом для гиперкубических решеток:

10.5 Мультифрактальность волновых функций вблизи критической точки (локализационного перехода).

Наряду с $\langle P_2 \rangle$ – вторым моментом плотности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ интересно рассмотреть и более высокие моменты:

$$P_q = \int |\psi_E(\mathbf{r})|^{2q} d^d \mathbf{r} \quad (171)$$

Для этих моментов можно получить формулы, аналогичные (166)

$$\langle P_q(E, L) \rangle \sim \frac{1}{a_0^{d(q-1)}} \begin{cases} (\xi/a_0)^{[d(q-1)-\tau_q]} (L/a_0)^{-d(q-1)}, & L \gg \xi, \quad \text{metal} \\ (L/a_0)^{-\tau_q}, & L \ll \xi, \quad \text{critical} \\ (\xi/a_0)^{-\tau_q}, & L \gg \xi, \quad \text{insulator} \end{cases} \quad (172)$$

где

$$\tau_q = D_q(q-1) \quad (173)$$

Набор величин D_q называется спектром фрактальных размерностей. Наличие множества различных фрактальных размерностей называется мультифрактальностью. Ниже мы увидим, что мультифрактальность связана с существованием длинных хвостов у функции распределения для величины $|\psi|^2$. Если бы мы наивно решили, что размер R локализованного состояния (т.е., длину локализации) можно определить из P_q просто “по размерности”, то мы пришли бы к парадоксальному результату

$$R_q \sim \langle P_q(E,) \rangle^{-\frac{1}{d(q-1)}} \sim a_0 (\xi/a_0)^{D_q/d}, \quad (174)$$

зависящему от q , т.е., от того, какой конкретный момент плотности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ выбран для усреднения. Причина этого парадокса в следующем: волновая функция занимает область локализации не плотно, а выборочно: места, где плотность велика, хотически чередуются с местами, где она мала. При этом конкретный смысл, вкладываемый в слова “мала” и “велика” зависит от величины q : при увеличении q главную роль начинают играть все более малые аномальные области со все большими значениями плотности. Поэтому величина R_q уменьшается с ростом q .

Легко убедиться в том, что знание функции D_q позволяет восстановить всю функцию распределения плотности $\mathcal{P}(|\psi|^2)$. В критической области ее можно представить в виде

$$\mathcal{P}(|\psi|^2) \sim \frac{1}{|\psi|^2 L^d} \exp \left\{ \ln L f \left(-\frac{\ln |\psi|^2}{\ln L} \right) \right\} \quad (175)$$

где вид функции $f(\alpha)$ определяется уравнениями

$$q = \frac{df(\alpha)}{d\alpha}, \quad (176)$$

$$\tau_q = q\alpha - f(\alpha). \quad (177)$$

Действительно, вычисляя

$$\langle P_q(E, L) \rangle \equiv L^d \int d|\psi|^2 \mathcal{P}(|\psi|^2) |\psi|^{2q} \quad (178)$$

по методу перевала (что оправдано большой величиной $\ln L$, получим

$$\langle P_q(E, L) \rangle = -\ln L \int d\alpha \exp \{ \ln L (f(\alpha) - q\alpha) \} \propto L^{-q\alpha(q) - f(\alpha(q))} \quad (179)$$

где $\alpha(q)$ нужно находить из уравнения (176). Отождествляя результат (179) с нижней строкой формулы (172), мы приходим к условию (177). Отметим еще, что должны быть выполнены очевидные требования

$$\tau_0 = -L \quad \tau_1 = 0 \quad (180)$$

(второе из них следует из нормированности волновых функций).

Найти точное аналитическое выражение для функции $f(\alpha)$ не удается, однако численные результаты показывают, что в трехмерном случае с очень хорошей точностью $f(\alpha)$ аппроксимируется в виде полинома второй степени. После удовлетворения требований (180) в этом полиноме остается всего один свободный параметр α_0 :

$$f(\alpha) = d - \frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{4(\alpha_0 - d)}, \quad D_q = d - (\alpha_0 - d)q \quad (181)$$

Наилучшему совпадению с численными данными соответствуют

$$\alpha_0 \approx \begin{cases} 4.03, & d = 3, \\ 6.5, & d = 4 \end{cases} \quad (182)$$

Итак, мы получили так называемое “лог-нормальное распределение” для волновой функции

$$\mathcal{P}(|\psi|^2) \sim \frac{1}{|\psi|^2} \exp \left\{ -\frac{[\ln^2(|\psi/\psi_0|^2)]}{4(\alpha_0 - d) \ln L} \right\} \quad (183)$$

где $\psi_0 \sim L^{-\alpha_0/2}$ имеет смысл типичного значения ψ :

$$|\psi_{\text{typ}}|^2 \equiv \exp \{ \langle \ln |\psi|^2 \rangle \} = |\psi_0|^2. \quad (184)$$

Величина $\alpha_0 - d$ характеризует степень мультифрактальности системы:

$$\frac{dD_q}{dq} = \alpha_0 - d, \quad \langle \ln |\psi/\psi_0|^2 \rangle = 2(\alpha_0 - d). \quad (185)$$

Таким образом, мультифрактальность (как и вообще фрактальность) растет с ростом d .

10.6 Задачи

10.6.1 Иерархическая структура мультифрактальных волновых функций

Считая систему критической ($L \ll \xi$), найдите долю $V(|\chi|^2)$ от полного объема образца $V_0 = L^d$, в которой $|\psi(r)|^2 > |\chi|^2$, причем $|\chi|^2 \gg |\psi_{\text{тип}}|^2$ больше типичного значения. Ответ выразите в терминах функции $f(\alpha)$.

11 Ближе к реальности: легированный полупроводник

В этой главе мы введем основные понятия, необходимые для описания слабо легированного полупроводника, в котором состояния носителей, локализованные на случайно расположенных примесях, слабо перекрываются. Такой полупроводник является наиболее контролируемой и хорошо экспериментально изученной неупорядоченной системой с сильной локализацией. Кроме того, слабо легированные полупроводники имеют множество важнейших приложений в электронике.

11.1 Доноры и акцепторы

Примеси бывают двух типов: доноры и акцепторы, концентрацию первых мы будем обозначать n_D , вторых – n_A . Донор – это такой примесный атом, который, будучи помещен в матрицу основного полупроводника, обнаруживает, что ему энергетически выгоднее отдать один из своих электронов в зону проводимости, чем держать его при себе. Если температура достаточно высока, то такой электрон совсем отрывается от своего донора и отправляется свободно гулять по образцу, как если бы мы имели дело с металлом. При низкой температуре, однако, необходимо учитывать кулоновское притяжение между положительно заряженным донорным ионом и оторвавшимся от него электроном. Это притяжение не дает электрону отойти слишком далеко от донора: электрон оказывается связан с донором подобно тому, как электрон связывается с протоном в атоме водорода. Имеется, однако, важное количественное отличие от атома водорода:

1. Эффективная масса электрона проводимости m_c^* в большинстве полупроводников значительно меньше массы свободного электрона m_0 (например, в GaAs $m_c^* \approx 0.066m_0$).

2. Кулоновское притяжение между электроном и донором в полупроводнике

$$U(r) = -e^2/r\kappa \quad (186)$$

значительно ослаблено за счет большой диэлектрической проницаемости κ (например, в GaAs $\kappa \approx 12.6$).

В результате совместного действия этих двух факторов волновая функция основного состояния связанного с донором электрона

$$\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp\{-r/a\}, \quad (187)$$

оказывается размазанной по довольно большому объему пространства, сильно превышающему объем элементарной ячейки:

$$a = \hbar^2 \kappa / m_e^* e^2 \sim 100 \text{\AA} \gg a_B = 0.5 \text{\AA}. \quad (188)$$

Именно этот факт позволяет использовать континуальное приближение (приближение эффективной массы) для уравнения Шредингера,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\kappa r} \right\} \psi = E\psi \quad (189)$$

описывающего волновую функцию. Соответственно, и энергия связи

$$E_0 = -\frac{m_e^* e^4}{2\kappa^2 \hbar^2}, \quad |E_0| \sim 5 - 10 \text{ meV} \ll Ry = 14 \text{ eV} \quad (190)$$

оказывается по абсолютной величине много меньше, чем энергия связи атома водорода.

Свойства акцепторов во многом аналогичны свойствам доноров, с той только разницей, что акцептор, наоборот, склонен присоединить к себе добавочный электрон, забирая его из валентной зоны, где образуется дырка с зарядом $+e$ и эффективной массой m_h^* .

На практике в полупроводнике всегда встречаются как доноры, так и акцепторы; если доминируют первые, то говорят о полупроводнике n -типа, если вторые, то о полупроводнике p -типа. Отношение концентрации неосновных носителей к концентрации основных называется степенью компенсации K ($K \leq 1$). Для определенности мы везде ниже будем рассматривать полупроводник n -типа, так что в нашем случае $K = n_A/n_D$.

Ясно, что при температурах $T \ll E_0$ электроны оказываются связанными с донорами. При этом говорить об электронах, связанных с

индивидуальными донорами, разумеется, можно лишь при условии, что характерные расстояния между донорами много больше размера волновых функций, т.е., при

$$n_D a^3 \ll 1. \quad (191)$$

Неравенство (191) обеспечивает также экспоненциальную слабость перекрытия волновых функций, а, значит, сильную локализацию электронных состояний в системе. Подавляющее число электронов локализованы вблизи одного своего донора, электроны, связанные с несколькими донорами и, тем более, делокализованные состояния, впервые появляются только в области локализационного перехода, при $n_D a^3 \sim 1$.

Полупроводник, в котором выполнено условие (191), называется слабо легированным, именно такие полупроводники мы и будем здесь обсуждать. При очень низкой температуре слабо легированный полупроводник n -типа устроен следующим образом: все доноры и все акцепторы создают соответствующее количество электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. Часть из них рекомбинирует между собой: при $n_D > n_A$ из системы уходят все дырки, унося с собой равное количество электронов, в результате остаются одни электроны с концентрацией $\tilde{n}_D = n_D - n_A$. Эти оставшиеся электроны связываются с соответствующим числом доноров. В результате мы имеем следующую картину

- Все акцепторы отрицательно заряжены.
- Часть доноров положительно заряжены, причем число заряженных доноров равно числу заряженных акцепторов.
- Остальные доноры (с концентрацией $n_D - n_A$) – “нейтральные”, т.е. имеют связанные с ними электроны.

В целом система, как и должно быть, электронейтральна. Вопрос о том, каким именно донорам быть заряженными, а каким – нейтральными, решается из соображений минимальности кулоновской энергии системы

$$H_C\{n_i\} = \frac{e^2}{\kappa} \left\{ \sum_{\text{acceptors } kk'} \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k'}|} + \sum_{\text{donors } ii'} \frac{(1 - n_i)(1 - n_{i'})}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} \right\} - \frac{e^2}{\kappa} \left\{ \sum_{\text{donors } i, \text{ acceptors } k} \frac{(1 - n_i)}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_i|} \right\}, \quad (192)$$

как функции чисел заполнения

$$n_i = \begin{cases} 1, & \text{neutral donor.} \\ 0, & \text{charged donor,} \end{cases} \quad (193)$$

Минимум нужно искать при дополнительном условии электронейтральности

$$\sum_i n_i = N = \mathcal{V}(n_D - n_A). \quad (194)$$

Подробнее вопрос о равновесном распределении $n_i^{(\text{opt})}$ электронов по донорам мы рассмотрим позднее.

11.2 Статистика электронных уровней слабо легированного полупроводника

На первый взгляд кажется разумным описывать слабо легированный полупроводник с помощью модели Лифшица с $na^3 \ll 1$, рассмотренной нами в главе 9. Однако имеется существенное отличие реальной ситуации от модели Лифшица, заключающееся в том, что, при ненулевой компенсации, в системе имеются кулоновские поля, создаваемые заряженными донорами и акцепторами. Эти поля приводят к разбросу Δ энергий связи E электронов на различных донорах, зависящему как от концентрации доноров, так и от степени компенсации. Величина этого разброса в типичном случае превышает экспоненциально малый матричный элемент перехода между различными донорами. В результате, в отличие от модели Лифшица, термодинамика легированного полупроводника (в частности, плотность состояний) целиком определяется чисто классической частью задачи – конфигурацией нейтральных и заряженных доноров, а квантовое туннелирование электронов между различными донорами проявляется только в транспортных эффектах.

Поскольку в интересующем нас случае электронные состояния сильно локализованы, статистика уровней полностью следует за функцией распределения $P(E)$ энергий связи на различных донорах. В частности

$$\nu(E) = n_D P(E) \quad (195)$$

Определение вида функции $P(E)$ представляет собой красивую и довольно сложную статистическую задачу. Здесь мы рассмотрим ее только конспективно, и только для наиболее важного случая слабой компенсации $K \ll 1$.

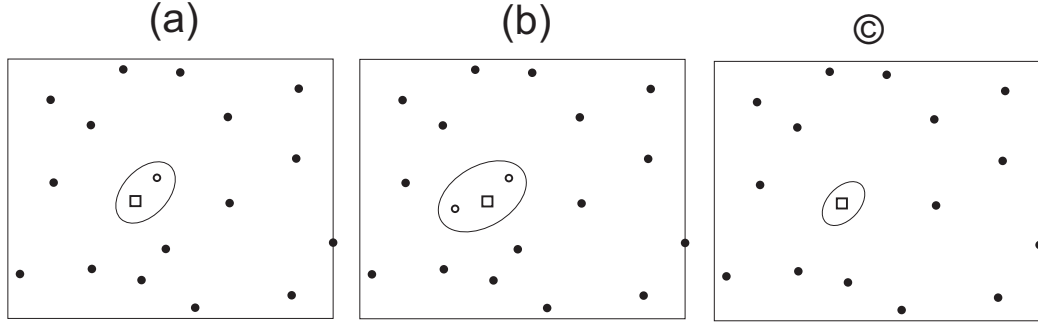


Рис. 7: Основные варианты выбора расположения заряженных доноров в слабо легированном и слабо компенсированном полупроводнике: темные кружки – нейтральные доноры, светлые кружки – заряженные доноры, квадратики – заряженные акцепторы. (а): Донорно-акцепторная пара (нейтральный 1-комплекс), (b): 2-комплекс с зарядом $+e$, (с): 0-комплекс с зарядом $-e$.

При $K \ll 1$ заряженные акцепторы редко разбросаны в море доноров. Интуитивно ясно, что заряженные доноры будут стремиться расположиться как можно ближе к акцепторам, образуя изолированные донорно-акцепторные пары (их еще называют 1-комплексами, см. ниже), причем расстояние между донорами и акцепторами внутри пары $\sim r_D$, а расстояние между различными парами $\sim r_A$ гораздо больше. Здесь

$$r_D = (4\pi n_D/3)^{-1/3}, \quad r_A = (4\pi n_A/3)^{-1/3}, \quad r_A \gg r_D. \quad (196)$$

Простейшее предположение заключается в том, что ВСЕ заряженные примеси разобьются на такие пары (см. рис. 7а). Аккуратный анализ, однако, показывает, что это не совсем верно. Дело в том, что существуют такие локальные конфигурации примесей, когда к одному и тому же акцептору с противоположных сторон близко прилегают два различных донора. В этом случае может оказаться энергетически выгодно сделать заряженными оба эти донора, которые, вместе с акцептором образуют так называемый 2-комплекс с полным зарядом $+e$ (см. рис. 7b). При удачном расположении отталкивание заряженных доноров внутри 2-комплекса слабее, чем притяжение к акцептору, поэтому такие 2-комплексы устойчивы. Возникает естественный вопрос: могут ли образовываться устойчивые комплексы с тремя или более заряженными донорами? Можно показать, что таких комплексов не существует (см. задачу 11.4.1).

С другой стороны, имеются такие локальные конфигурации, когда поблизости от акцептора нет ни одного донора (ближайший донор на-

ходится довольно далеко). Такой акцептор выгодно оставить вообще без пары – он образует 0-комплекс с зарядом $-e$ (см. рис. 7с). Схема расчета равновесных концентраций 0-комплексов n_0 и 2-комплексов n_2 (и, одновременно, определения равновесного химического потенциала μ) сводится к следующему:

Найдем n_0 и n_2 как функции химического потенциала:

$$n_0 = n_A f_0 \left(\frac{\mu - E_0}{\varepsilon_D} \right), \quad n_2 = n_A f_2 \left(\frac{\mu - E_0}{\varepsilon_D} \right), \quad (197)$$

где $E_0 = -e^2/\kappa a$ – энергия связи уединенного донора, а

$$\varepsilon_D = e^2/\kappa r_D, \quad (198)$$

характерная величина связи донорно-акцепторной пары. Универсальная функция f_0 монотонно растет, как функция своего аргумента, а f_2 – монотонно убывает. Мы не будем здесь воспроизводить вывод явных выражений для f_0 и f_2 , его можно посмотреть в книге Эфроса и Шкловского. Приведем только окончательный результат:

$$f_0(z) = \exp\{-z^{-3}\}, \quad f_2(z) \approx 0.7 \cdot 10^{-3} z^{-6}, \quad (199)$$

Из условия электронейтральности следует, что в равновесии концентрации 0- и 2-комплексов должны совпадать:

$$n_0 = n_2. \quad (200)$$

Подставляя (197) в (200), и численно решая получившееся уравнение

$$f_0(z) = f_2(z), \quad (201)$$

находим равновесные значения $z_0 \approx 0.61$ и $f_0(z_0) = f_2(z_0) \approx 1.6 \cdot 10^{-2}$.

Итак, мы определили химпотенциал

$$\mu - E_0 = 0.61 \varepsilon_D. \quad (202)$$

Дадим физическое объяснение этого результата. При $K \ll 1$ почти все доноры должны быть заполнены электронами. Это значит, что химический потенциал электронов μ должен лежать заметно выше пика плотности состояний, на расстоянии от него, много большем, чем его ширина Δ : $\mu - E_0 \gg \Delta$ (см. рис. 8). И действительно, химический потенциал обязан находиться в области энергий, соответствующих донорам, принадлежащим донорно-акцепторным парам. С другой стороны, как мы

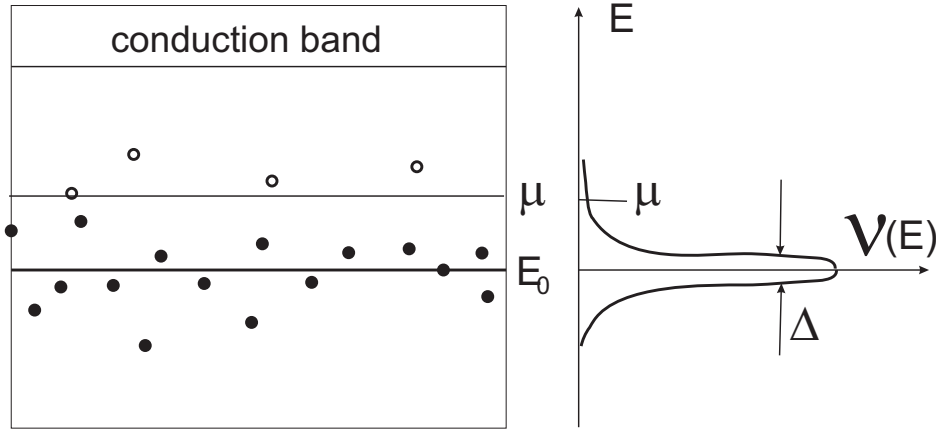


Рис. 8: Плотность электронных состояний $\nu(E)$ в слабо легированном и слабо компенсированном полупроводнике: темные кружки – нейтральные доноры (занятые электронные состояния, лежащие ниже уровня химического потенциала μ), светлые кружки – заряженные доноры (пустые электронные состояния выше химического потенциала). Δ – ширина разброса уровней относительно E_0 – положения уровня уединенного донора в запрещенной зоне под зоной проводимости.

уже говорили, размер донорно-акцепторной пары $\sim r_D$. Поэтому энергия, необходимая для того, чтобы пересадить электрон на донор из пары с какого-нибудь типичного донора, соответствующего центральной части пика плотности состояний, нужно затратить энергию $\sim \varepsilon_D$. Отсюда немедленно следует, что $\mu - E_0 \sim \varepsilon_D \gg \Delta$.

Решая задачу определения химического потенциала, мы параллельно нашли и равновесные концентрации заряженных комплексов

$$n_0 = n_2 = 1.6 \cdot 10^{-2} n_A. \quad (203)$$

Хотя в задаче нет никакого малого параметра, по которому можно было бы ожидать относительной малости n_0 по сравнению с n_A , приведенный выше расчет показал, что концентрация заряженных комплексов численно мала, поэтому подавляющее число заряженных примесей связаны в нейтральные донорно-акцепторные пары. Вместе с тем, вовсе пренебречь наличием заряженных комплексов было бы неправильно: именно они создают дальнодействующие кулоновские поля, приводящие к разбросу уровней Δ . Мы определим величину этого разброса в следующем разделе.

11.3 Дальнодействующие случайные поля и разброс донорных уровней

Выражения (197) описывают средние концентрации комплексов, истинные же локальные концентрации флуктуируют от точки к точке:

$$n_0(\mathbf{r}) = n_0 + \xi_0(\mathbf{r}), \quad n_2(\mathbf{r}) = n_2 + \xi_2(\mathbf{r}). \quad (204)$$

Поскольку нас будет интересовать поведение системы на расстояниях, много больших чем характерное расстояние между заряженными комплексами $(4\pi n_0/3)^{1/3}$, случайные величины ξ можно считать δ -коррелированными:

$$\langle \xi_0(\mathbf{r})\xi_0(\mathbf{r}') \rangle = \langle \xi_2(\mathbf{r})\xi_2(\mathbf{r}') \rangle = n_0\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \langle \xi_0(\mathbf{r})\xi_2(\mathbf{r}') \rangle = 0. \quad (205)$$

Если пренебречь корреляцией в расположении различных заряженных комплексов – считать, что они случайно набросаны в пространстве – то соответствующие им случайные поля $V(\mathbf{r})$ вообще оказываются бесконечными: они расходятся за счет вклада далеких комплексов (см. задачу 11.4.2). Это означает, что необходимо учитывать корреляции, приводящие к дебаевской экранировке кулоновских полей:

$$V(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\xi_0(\mathbf{r}') - \xi_2(\mathbf{r}')], \quad K(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\kappa r} \exp\{-r/r_0\} \quad (206)$$

и обрезанию расходимости (см. задачу 11.4.4). При учете экранировки случайный потенциал $V(\mathbf{r})$, становится конечным. Так как этот потенциал создается многими независимыми заряженными примесями, он подчиняется гауссовой статистике (см. главу 6):

$$P(\{V\}) \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}') \right\}, \quad (207)$$

с корреляционной функцией $\hat{g} \equiv \hat{\gamma}^{-1}$,

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}) &\equiv \langle V(\mathbf{R} + \mathbf{r}) V(\mathbf{R}) \rangle = \\ &= \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 K(\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{r}_1) K(\mathbf{R} - \mathbf{r}_2) \langle [\xi_0(\mathbf{r}_1) - \xi_2(\mathbf{r}_1)] [\xi_0(\mathbf{r}_2) - \xi_2(\mathbf{r}_2)] \rangle \end{aligned}$$

Выполняя усреднение с использованием соотношений (205), получим

$$g(\mathbf{r}) = 2n_0 \int d^3\mathbf{r}_1 K(\mathbf{R} + \mathbf{r} - \mathbf{r}_1) K(\mathbf{R} - \mathbf{r}_1)$$

Оставшееся интегрирование можно произвести, например, переходя к Фурье представлению. В результате

$$g(\mathbf{r}) = \Delta^2 e^{-r/r_0}, \quad \Delta = 0.18 K^{1/4} \varepsilon_D, \quad (208)$$

При $K \ll 1$ радиус корреляции

$$r_0 = 0.58 \cdot n_A^{-1/3} K^{-1/6} = 0.24 \cdot (4\pi n_0/3)^{-1/3} K^{-1/6} \quad (209)$$

(он же – радиус экранировки) при достаточно малом K больше, чем характерное расстояние между заряженными комплексами $(4\pi n_0/3)^{-1/3}$. Из (207) и (208), в частности, следует выражение для плотности состояний

$$\nu(E) = \frac{n_D}{\Delta \sqrt{2\pi}} \exp\{-(E - E_0)^2 / 2\Delta^2\}. \quad (210)$$

Заметим, во избежание недоразумений, что гауссово распределение справедливо только не слишком далеко от центральной части пика. В области далеких хвостов (и, в частности, вблизи химического потенциала, см. ниже) плотность состояний становится негауссовой и уже не описывается формулой (210). Мы не будем здесь останавливаться на выводе выражений для хвостов плотности состояний, приведем только оценку для ее значения на уровне Ферми:

$$\nu(\mu) \sim n_A / \varepsilon_D \ll \nu(E_0) \sim n_D / \Delta. \quad (211)$$

В заключение подчеркнем, что построение аналитической теории, изложенной в этой главе, оказалось возможным только благодаря наличию малого параметра $K \ll 1$. Численные исследования показывают, что полученные формулы дают количественно правильные результаты только при весьма малых $K < 10^{-4}$. Качественные выводы, однако, приближенно справедливы и при больших значениях K .

11.4 Задачи

11.4.1 Заряженные донорно-акцепторные комплексы

Покажите, что комплексы из одного акцептора и N доноров энергетически выгодны только при $N \leq 2$.

11.4.2 Расходимость потенциала некоррелированных примесей

Покажите, что электростатический потенциал, создаваемый хаотически (без корреляций) расположенными зарядами расходится даже в том случае, когда система в среднем нейтральна – средние концентрации положительных и отрицательных зарядов совпадают.

11.4.3 Вклад донорно-акцепторных пар в случайный потенциал

Оцените случайный потенциал, создаваемый донорно-акцепторными парами. Покажите, что, несмотря на гораздо большее число пар, этот вклад меньше вклада заряженных комплексов.

11.4.4 Линейное экранирование в слабо легированном слабо компенсированном полупроводнике

Покажите, что потенциал внешнего заряда $\rho(\mathbf{r})$, помещенного в слабо легированный слабо компенсированный полупроводник, экранируется по закону Дебая (206) и определите радиус экранирования r_0 , выразив его в терминах функций f_0, f_2 .

12 Обзор механизмов проводимости слабо легированного полупроводника в разных температурных интервалах

При низких температурах транспорт в слаболегированных полупроводниках осуществляется за счет механизма “прыжковой проводимости”, в котором электроны совершают неупругие туннельные переходы между донорами с различающимися энергиями связи, а недостающая (или избыточная) энергия восполняется (или уносится) фононами. Прыжковую проводимость мы будем подробно изучать в следующей главе, а здесь перечислим различные режимы проводимости, актуальные в различных условиях (см. задачу 12.1.1).

- Рис.9(А) Собственная проводимость. Она осуществляется за счет термически возбужденных через запрещенную зону носителей (электрон-дырочных пар). Химический потенциал лежит вблизи середины запрещенной зоны, концентрация носителей $n_{\text{intr}}(T) \propto$

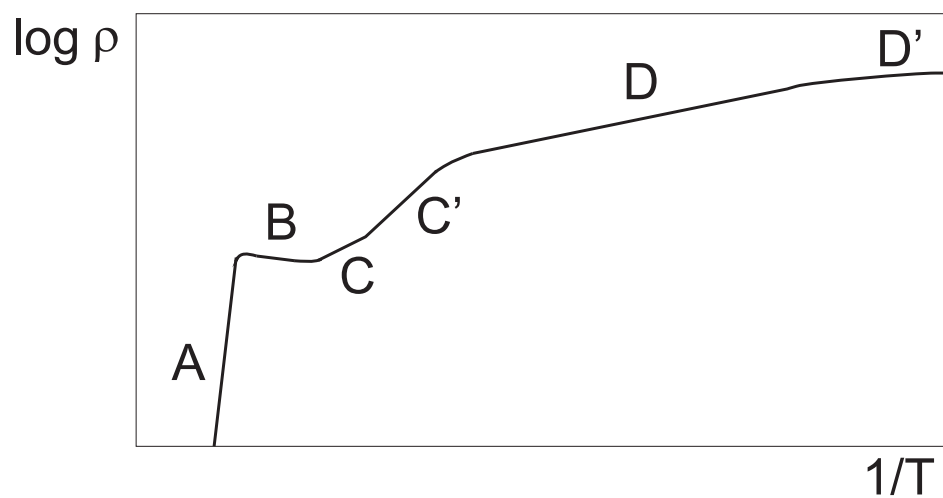


Рис. 9: Зависимость логарифма удельного сопротивления слабо легированного полупроводника ρ от обратной температуры (схематически). (A) – собственная проводимость, (B) – режим истощения, (C) – режим вымораживания, (D) – прыжковая проводимость по ближайшим соседям (линейный наклон) (D') – прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка (нелинейный наклон)

$\exp\{-E_g/2T\}$; экспоненциальная зависимость проводимости $\sigma_A(T)$ от температуры в этом режиме определяется именно температурной зависимостью концентрации:

$$\sigma_A(T) \propto \exp\{-E_A/T\}, \quad E_A = E_g/2. \quad (212)$$

В этом высокотемпературном режиме легирование не оказывает существенного влияния на проводимость, так как доля носителей, поставляемых донорами, относительно мала по сравнению с долей термически возбужденных носителей: $n_D \ll n_{\text{intr}}(T)$.

- Рис.9(В) “Режим истощения”. В этой области температур все доноры ионизованы, и проводимость осуществляется электронами, оторвавшимися от доноров. Их концентрация $n_D - n_A \gg n_{\text{intr}}(T)$ не зависит от температуры, поэтому температурная зависимость σ определяется повышением подвижности с понижением температуры (неэкспоненциальная зависимость).
- Рис.9(С) “Режим вымораживания 1”. Здесь проводимость по-прежнему осуществляется электронами, оторванными от доноров, но число этих электронов уже экспоненциально мало, так как экспоненциально мало число ионизованных доноров. При не слишком низкой температуре число термически ионизованных доноров $n(T)$, будучи малым, все еще превышает число n_A доноров, ионизованных за счет рекомбинации с дырками, поставляемыми акцепторами. В этой ситуации химический потенциал лежит примерно посередине между краем зоны проводимости и уровнем изолированной примеси E_0 , так что $\sigma \propto n(T) \propto \exp\{-|E_0|/2T\}$, т.е.. энергия активации $E_A = |E_0|/2$.
- Рис.9(С') “Режим вымораживания 2”. Здесь все похоже на режим С', но при более низких температурах, когда $n(T) \ll n_A$ и химпотенциал устанавливается на уровне изолированной примеси. Поэтому вымораживание происходит быстрее: $\sigma \propto n(T) \propto \exp\{-|E_0|/T\}$, т.е.. энергия активации в два раза больше: $E_A = |E_0|$.
- Рис.9(Д) При еще более низких температурах число электронов, активированных в зону проводимости становится настолько малым, что главный вклад в проводимость дают прыжки электронов с примеси непосредственно на другую примесь, без активации в зону. Это и есть прыжковая проводимость (hopping). Она возможна только в том случае, когда в системе имеются как заполненные, так и пустые доноры, т.е., при ненулевой степени компенсации. При низких, но не

самых низких температурах электроны совершают прыжки между ближайшими донорами (nearest neighbor hopping), при этом наблюдается активационная зависимость проводимости от температуры $\sigma \propto \exp(-E_3/T)$ с малой энергией активации $E_3 \sim \varepsilon_D \ll |E_0|$.

- Рис.9(D') Здесь электроны совершают прыжки на далеких соседей, зато с близкими энергиями (variable range hopping). Зависимость проводимости от температуры имеет вид $\sigma \propto \exp(-(T_0/T)^\alpha)$, где $\alpha < 1$ зависит от того, насколько существенную роль играют кулоновские корреляции.

12.1 Задачи

12.1.1 Термодинамика легированного полупроводника

Рассмотрим легированный полупроводник n -типа с простыми изотропными зоной проводимости (эффективная масса m_c) и валентной зоной (эффективная масса m_v). Концентрация доноров n_D , концентрация акцепторов n_A ($n_A < n_D$). Энергия связи электрона на доноре E_0 (разброс энергий доноров из-за случайных кулоновских полей и взаимодействие электронов между собой не учитывайте). Ширина запрещенной зоны $E_g \gg E_0$.

Исследуйте термодинамический потенциал электронов в таком полупроводнике. Определите температурную зависимость положения химпотенциала электронов $\mu(T)$ и концентрации электронов в зоне проводимости $n_c(T)$ в различных температурных диапазонах. Отдельно рассмотрите случаи умеренной компенсации ($n_D - n_A \sim n_D$), слабой ($n_A \ll n_D$) и сильной ($n_D - n_A \ll n_D$).

13 Прыжковая проводимость

В режиме прыжковой проводимости электрон совершает реальные (не виртуальные!) туннельные переходы между локализованными состояниями, а как мы знаем, при реальных переходах энергия должна сохраняться. Вместе с тем, состояния на различных донорах, между которыми происходят переходы, вообще говоря, имеют разные энергии. Существуют два принципиально разных способа разрешения этого противоречия:

1. Электрон-фононный сценарий. Избыточная (или недостающая) энергия должна отдаваться термостату, или отбираться от термостата. В роли термостата выступают акустические фононы (phonon assisted hops).

2. Многоэлектронный сценарий. Переход имеет сложный характер: одновременно происходит много (строго говоря – бесконечное число) прыжков разных электронов между различными парами доноров, причем в каждом из них по отдельности энергия не сохраняется, но удовлетворяется полный баланс.

Оба эти сценария были выдвинуты примерно одновременно и уже очень давно, но судьба их очень различна. Электрон-фононный сценарий прекрасно разработан, он позволяет объяснить множество экспериментальных данных (по крайней мере в том, что касается экспоненциальных зависимостей). Многоэлектронный сценарий по сути дела так и остался на уровне красивой идеи, которая, впрочем, снова и снова привлекает внимание и вызывает попытки как-то воплотить ее в жизнь. Проблема заключается в чрезвычайной трудности теоретического описания многоэлектронных переходов. Даже стремительное развитие численных методов в последние годы не позволило получить надежные результаты, а предлагаемые время от времени аналитические подходы опираются на довольно произвольные предположения и не вызывают доверия.

Вместе с тем имеются некоторые факты, говорящие скорее в пользу многоэлектронного сценария. Например, во многих экспериментах наблюдалась универсальность предэкспоненциального множителя прыжковой проводимости. В случае чисто электронного сценария этот множитель зависит только от универсального кулоновского взаимодействия, в то время как для фононов он пропорционален квадрату константы электрон-фононного взаимодействия, очень сильно различающейся в разных веществах. Но, конечно же, для того, чтобы принять многоэлектронную версию, нужно было бы сначала объяснить с ее помощью множество других фактов, которые успешно объясняются в рамках электрон-фононного сценария. Никто этого пока не сделал, но никто и не доказал невозможности этого.

Впрочем, имеется некоторая возможность объединить оба подхода. Дело в том, что в фононном сценарии акустические фононы в качестве термостата с легкостью могут быть заменены на любые другие бозонные возбуждения системы. Нужно только, чтобы эти возбуждения удовлетворяли двум требованиям:

- Их спектр не должен иметь щели при нулевой энергии (поэтому, например, не подходят оптические фононы). Если бы щель была, то сохранение энергии нельзя было бы обеспечить при малой (меньшей, чем щель) разности энергий локализованных электронных состояний.

- Пространственные моды, соответствующие этим возбуждениям, должны иметь делокализованный характер. Действительно рассмотрим электронный переход между какими-нибудь двумя локализованными электронными состояниями. Этот переход также имеет определенную область пространственной локализации, поэтому для его осуществления можно воспользоваться помощью только тех бозонных мод, которые имеют ненулевую амплитуду в этой области. В случае локализованных мод только конечное их количество может удовлетворять этому требованию и вероятность того, что среди этого конечного числа мод найдется такая, которая имеет вполне определенную нужную энергию, равна нулю.

Весьма вероятно, что перечисленным выше критериям удовлетворяют “дипольные” колебания, возникающие в системе локализованных электронов при учете как туннелирования (в низшем порядке), так и кулоновского взаимодействия. Переход электрона между парой близких доноров изменяет электрические поля, действующие на другие пары и, таким образом, может вызывать переходы в этих других парах. В результате дипольное возбуждение распространяется по системе. Это возбуждение, вследствие достаточно дальнего действия характера диполь-дипольного взаимодействия, оказывается делокализованным. Поэтому эффективные “фононы” можно устроить из самих электронов, причем эти фононы, обусловленные исключительно кулоновским взаимодействием, обладают универсальными свойствами. Впрочем, имеются аргументы в пользу того, что такой механизм прыжковой проводимости эффективен только при температурах, выше некоторой критической. Ниже этой температуры переходы оказываются возможными только при участии самых настоящих решеточных фононов. Соответствующая теория еще не до конца разработана.

Ниже мы будем излагать традиционную – фононную – теорию прыжковой проводимости, имея в виду, что при определенных выше условиях чисто электронные теории должны приводить к тем же результатам.

13.1 Сетка сопротивлений Миллера и Абрахамса

Поскольку прыжки сопровождаются поглощением или излучением фононов, ясно, что когерентность системы нарушается после каждого прыжка, никакой интерференции между различными прыжками быть не должно, и можно спокойно пользоваться вероятностями (а не амплитудами) прыжков. Мы будем оценивать эти вероятности, обращая внимание только на экспоненциальные факторы. В равновесии частота

переходов между донорами i и j

$$\Gamma_{ij} \propto |M_{ij}|^2 f_F(E_i) [1 - f_F(E_j)] N(E_i - E_j), \quad (213)$$

где $f_F(E) = [1 + e^{(E-\mu)/T}]^{-1}$ – фермиевская, а $N(\omega) = [1 - e^{\omega/T}]^{-1}$ – планковская функции распределения.

- Первый сомножитель в (213) представляет собой квадрат матричного элемента электрон-фононного взаимодействия между состояниями электрона, локализованными, соответственно, на i (начальное состояние) и на j (конечное состояние) донорах. Кроме того, начальное и конечное состояние отличаются на один фонон с энергией $|E_i - E_j|$. При $E_i > E_j$ этот фонон присутствует в конечном состоянии, а при $E_i < E_j$ – в начальном. Вообще говоря, $|M_{ij}|^2$ – сложная функция координат и энергий, но единственная *экспоненциальная* зависимость этого сомножителя содержится в квадрате модуля интеграла перекрытия

$$|I(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)|^2 = \left| \int d^3\mathbf{r} \psi_0^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \right|^2. \quad (214)$$

Как показано в задаче 13.3.1, экспоненциальная зависимость интеграла перекрытия может быть выражена в терминах классического подбарьерного действия $\tilde{S}(\mathbf{r}', \mathbf{r})$

$$I(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \propto \exp \left\{ -\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) \right\}, \quad (215)$$

$$\tilde{S}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) = -\frac{i}{\hbar} \int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}'} \mathbf{P}(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (216)$$

где $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$ – положения, соответственно, i -го и j -го доноров, а $\mathbf{P}(\mathbf{x})$ – канонический импульс электрона с энергией E_0 в точке $\mathbf{x}$ классической траектории, соединяющей точки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$. Если (как в нашем случае) энергия $E_0 < 0$, то время движения становится мнимым, а подбарьерное действие $\tilde{S}$ вещественно и положительно.

- Второй и третий сомножители в (213) – вероятности того, что начальное электронное состояние заполнено, а конечное – пусто.

Наконец, четвертый сомножитель – вероятность найти в термостате нужный фонон при $E_i < E_j$, а при $E_i > E_j$ вероятность отдать нужный фонон термостату $1 + N(E_j - E_i) \equiv N(E_i - E_j)$.

В экспоненциальном приближении все эти три сомножителя могут быть записаны в виде

$$\exp\{-\varepsilon_{ij}/T\} \quad \varepsilon_{ij} \equiv \frac{1}{2} \{ |E_i - E_j| + |E_i - \mu| + |E_j - \mu| \} \quad (217)$$

Собирая вместе результаты (216) и (217) В экспоненциальном приближении мы можем записать

$$\Gamma_{ij} \propto \exp\{-2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) - \varepsilon_{ij}/T\}. \quad (218)$$

В равновесии число переходов $i \rightarrow j$ и $j \rightarrow i$ – одинаково и ток между двумя донорами отсутствует. При приложении внешнего поля равновесие нарушается: энергии уровней E_i приобретают добавку $E_i \rightarrow E_i + \delta E_i$, а химические потенциалы электронов на донорах сдвигаются $\mu \rightarrow \mu + \delta \mu_i$. В результате возникает ток, в линейном приближении по δE_i и $\delta \mu_i$ равный

$$\mathcal{I}_{ij} = (U_i - U_j)/R_{ij}, \quad (219)$$

где $U_i \equiv -(\delta E_i + \delta \mu_i)/e$ – отсчитанное от μ локальное значение электрохимического потенциала, а

$$R_{ij} = T/e^2 \Gamma_{ij} = R_{ij}^{(0)} e^{\xi_{ij}} \quad (220)$$

$$\xi_{ij} = 2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) + \varepsilon_{ij}/T, \quad (221)$$

играет роль эффективного сопротивления перехода ij . Величина $R_{ij}^{(0)}$, конечно, тоже зависит от i и j , но эта зависимость не экспоненциальная и мы будем ею пренебрегать, считая, что $R_{ij}^{(0)} = R_0 = \text{const}$.

Таким образом, задача определения эффективной проводимости сводится к следующему:

- Рассмотрим электрическую цепь, узлами которой являются все доноры в образце (для простоты представим образец в виде параллелепипеда длины L и сечения S), причем между каждой парой доноров ij включено сопротивление R_{ij} , определяемое формулой (220). Эта цепь называется сеткой сопротивлений Миллера-Абрахамса по имени людей, впервые предложивших такой способ описания прыжковой проводимости.
- Положим напряжение на всех донорах, примыкающих к левой границе образца, равным нулю, а на донорах, примыкающих к правой границе – равным V . Решим уравнения Кирхгофа и найдем напряжения на всех узлах V_i и токи на всех сопротивлениях $\mathcal{I}_{ij} = (V_j - V_i)/R_{ij}$.
- Проведем воображаемую плоскость, пересекающую образец и сочитаем сумму $\mathcal{I}_{\text{tot}}$ всех токов по всем связям, пронизывающим эту плоскость. Проводимость системы σ определится из соотношения $\sigma = L\mathcal{I}_{\text{tot}}/SV$

Конечно, явно решить систему уравнений Кирхгофа для макроскопически большого числа случайно расположенных доноров невозможно. Однако следует ожидать, что проводимость системы – величина самоусредняющаяся, и в ансамбле достаточно больших образцов, отличающихся друг от друга только конфигурацией расположения примесей, проводимости разных образцов будут различаться очень слабо, а в термодинамическом пределе не будут различаться вовсе. Способ определения проводимости бесконечно большого образца будет описан в следующем разделе.

13.2 Прыжковая проводимость и теория перколяции

Сопротивления $R_{ij} = R_0 e^{\xi_{ij}}$, составляющие сетку Миллера-Абрахамса, экспоненциально зависят от пространственных положений доноров $\mathbf{r}_i$ и от их энергий E_i . Если характерные расстояния между донорами $r_D \gg a$ (а это именно так в интересующем нас случае слабого легирования), то разброс значений R_{ij} оказывается очень большим. При этом ясно, что очень большие сопротивления не должны играть никакой роли – ток по ним не потечет, и поэтому соответствующие связи ij можно считать просто разомкнутыми ($R_{ij} = \infty$). С другой стороны, на очень маленьких сопротивлениях падения напряжения практически не будет, поэтому соответствующие связи ij можно считать коротко замкнутыми: ($R_{ij} = 0$). Проводимость системы будет определяться величиной граничного сопротивления $R_c = R_0 e^{\xi_c}$, такого, что все $R_{ij} \gg R_c$ можно считать “очень большими” и заменить на бесконечные, а все $R_{ij} \ll R_c$ – “очень маленькими” и заменить на нулевые. Итак, с экспоненциальной точностью мы можем написать $\sigma \propto R_c^{-1} \propto e^{-\xi_c}$ и наша задача сводится к определению величины ξ_c . Что значит – “большие” и “маленькие”? Из каких соображений в нашем случае нужно определять это зыбкое понятие?

Сразу заметим, что различным образом определенные средние сопротивления типа $\bar{R}_\lambda = \langle R_{ij}^\lambda \rangle^{1/\lambda}$ явно не имеют отношения к делу: при $\lambda > 0$ $\bar{R}_\lambda$ вообще расходится, (за счет далеких пар), а при $\lambda < 0$ определяется аномально близкими парами и поэтому экспоненциально меньше “типичного сопротивления”. Ясно, что такие маленькие сопротивления встречаются очень редко и не могут определять значение эффективной проводимости. На первый взгляд кажется более разумным предположить, что $R_c \sim \bar{R}_{\log} \equiv \exp\{\langle \ln R_{ij} \rangle\}$, но и это предположение оказывается неверным: величина $\bar{R}_{\log}$ также расходится, хотя и медленнее, чем $\bar{R}_{\lambda>0}$.

Правильная стратегия определения величины R_c в экспоненциальном приближении основывается на соображениях теории перколяции.

Давайте выберем некоторое значение сопротивления $\tilde{R}$ и разорвем все

связи с $R_{ij} > \tilde{R}$. Если рассмотреть граф, вершинами которого являются доноры, а связями – оставшиеся неразорванными сопротивления, то этот граф, вообще говоря, распадется на множество не связанных между собой подграфов – кластеров. Если взять $\tilde{R}$ очень большим, то система, очевидно, будет состоять из одного большого (содержащего почти все вершины графа) кластера и редких небольших кластеров. Большой кластер принято называть бесконечным, если он содержит конечную долю полного (в термодинамическом пределе – бесконечного) числа узлов. Очевидно, в нашем случае большой кластер удовлетворяет этому определению. Маленькие конечные кластеры при большом $\tilde{R}$ образуются в основном из “уединенных узлов” – таких узлов i , что ξ_{ij} аномально велико ($> \ln \tilde{R}$) для всех j . Простейший пример уединенного узла – донор, оказавшийся внутри “полости”.

Наоборот, если взять $\tilde{R}$ очень маленьким, то в системе останется очень мало связей: почти все кластеры будут состоять из одного единственного узла, будет немножко пар, еще меньше – троек и т.д. Самое главное – в системе не будет ни одного бесконечного кластера.

Наличие бесконечного кластера – топологическое свойство: либо он есть, либо его нет. Поэтому можно утверждать, что должно существовать некоторое значение $\tilde{R} = \tilde{R}_c$, при котором бесконечный кластер появляется впервые. С другой стороны, очевидно, что проводимость по системе конечных несвязанных между собой кластеров невозможна. Это означает, что при прохождении тока через систему, ему непременно придется проходить через сопротивления с величиной $R > \tilde{R}_c$, и следовательно, $R_c \geq \tilde{R}_c$. Так же легко сообразить, что R_c не может быть сильно больше, чем $\tilde{R}_c$. Действительно, из предположения $R_c \gg \tilde{R}_c$ следовало бы, что связи с $R_{ij} \sim \tilde{R}_c$ не несут сколько нибудь заметного тока, а значит, их можно разорвать без особого вреда для проводимости, в противоречии с определением величины $\tilde{R}_c$.

Итак, мы убедились в том, что $R_c \geq \tilde{R}_c$. Это означает, что общий метод определения экспоненциальной зависимости σ от параметров должен сводиться к следующему:

1. Рассмотрим сетку сопротивлений Миллера-Абрахамса с $R_{ij} = R_0 e^{\xi_{ij}}$ где ξ_{ij} определяется формулой (221), а статистика положений доноров $\mathbf{r}_i$ и их энергий E_i диктуется физическими условиями задачи (эти условия могут сильно различаться, и результат решения задачи будет сильно от них зависеть).
2. Найдем порог перколяции ξ_c , отвечающий условию возникновения бесконечного кластера в системе, в которой все связи с $\xi_{ij} > \xi_c$ разорваны. Значение порога будет зависеть как от параметров, опре-

деляющих вид функции ξ_{ij} , так и от параметров, определяющих статистику.

3. Искомая экспоненциальная зависимость определится из

$$\sigma \propto e^{-\xi_c} \quad (222)$$

13.3 Задачи

13.3.1 Связь интеграла перекрытия с подбарьерным действием

Докажите соотношение (215).

13.3.2 Подбарьерное действие в анизотропном случае

Электрон со спектром $\varepsilon(\mathbf{k})$ в поле короткодействующей притягивающей примеси, расположенной в точке $\mathbf{r} = 0$, образует связанное состояние с энергией $E_0 < 0$. (E_0 отсчитывается от дна зоны, т.е., от минимума $\varepsilon(\mathbf{k})$)

Для произвольного направления вектора $\mathbf{r}$ определите показатель экспоненты $\tilde{S}(\mathbf{r})$ волновой функции связанного состояния $\psi_0(\mathbf{r}) \propto \exp\{-\tilde{S}(\mathbf{r})\}$ на больших расстояниях от примеси. Для случая произвольной функции $\varepsilon(\mathbf{k})$ выведите уравнения для нахождения $\tilde{S}(\mathbf{r})$. Решите эти уравнения для двух конкретных примеров:

1. $\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{k_x^2}{2m_x} + \frac{k_y^2}{2m_y} + \frac{k_z^2}{2m_z}$
2. $\varepsilon(\mathbf{k}) = -t[\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z]$, $t > 0$, Для простоты ограничьтесь случаем, когда вектор $\mathbf{r}$ лежит в плоскости xy .

14 Прыжковая проводимость по ближайшим соседям

Величина ξ_{ij} состоит из двух частей (см. формулу (221): из них первая, $2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ совсем не зависит от температуры, в отличие от второй части, ε_{ij}/T . Поэтому естественно предположить, что в зависимости от температуры, второе слагаемое, может играть либо второстепенную (при $T > T^*$), либо, наоборот, определяющую (при $T < T^*$) роль. В этом разделе мы сосредоточимся на первой из этих двух возможностей.

Итак, мы будем предполагать, что для типичных связей, определяющих пути протекания тока по системе

$$2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) \gg \varepsilon_{ij}/T, \quad (223)$$

Ясно, что при этом должно получаться

$$\xi_c = \xi_c^{(0)} + \delta\xi_c, \quad (224)$$

где $\xi_c^{(0)}$ – результат решения описанной в предыдущем разделе задачи, в которой $\xi_{ij} = 2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$. Так как в такой задаче сопротивление между двумя донорами определяется исключительно их относительным положением (а не соответствующими энергиями), понятно, что ток, как правило, будет течь между близкими донорами, не обращая внимания на то, какие у них энергии. Именно отсюда и происходит термин “прыжковая проводимость по ближайшим соседям” – Nearest Neighbor Hopping (NNH)

Величина $\delta\xi_c$ в выражении (224) – относительно малая поправка, обусловленная вторым слагаемым в формуле (221). Сразу подчеркнем, что ее относительная малость не означает несущественности: мы увидим, что в слабо легированном полупроводнике $\xi_c^{(0)} \gg 1$ поэтому условие $\xi_c^{(0)} \gg \delta\xi_c$ вполне может быть совместимо с условием $\delta\xi_c > 1$. Важность этой поправки в том, что именно она определяет зависимость ξ_c от температуры. Ее вычисление мы пока отложим и займемся нахождением величины $\xi_c^{(0)}$, содержащей в себе главную зависимость проводимости от концентрации и от других параметров, влияющих на вид функции $\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$ – таких, как магнитное поле, анизотропия спектра, деформация кристалла.

14.1 Зависимость от концентрации доноров

В отсутствие магнитного поля и в предположении изотропии электронного спектра выражение для подбарьерного действия приобретает простой вид:

$$\xi_{ij} = 2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i) = 2|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|/a, \quad (225)$$

и задача перколяции может быть сформулирована следующим образом:

- В пространстве размерности d случайным образом с концентрацией n_D разбросаны точки.
- Точки i и j связаны, если $|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| < r_0$.
- Спрашивается, при каком условии в системе имеется бесконечный кластер связанных точек?

Решение этой задачи хорошо известно. Перколяция возникает, если среднее число $\bar{B}$ связей у точки достигает некоторого критического значения $B_{\text{cr}}(d)$:

$$\bar{B} = B_{\text{cr}}(d). \quad (226)$$

Аналитически определить значения $B_{\text{cr}}(d)$ не удастся, но численные расчеты показывают, что $B_{\text{cr}} \approx 2.7$ при $d = 3$ и $B_{\text{cr}} \approx 4$ при $d = 2$. С другой стороны, легко подсчитать $\bar{B} = V(r_0)n_D$ (где $V(r_0) = V(1)r_0^d$ – объем d -мерного шара радиуса r_0).

Как следует из формулы (225), в нашем случае $r_0 = \xi a/2$, поэтому условие перколяции, определяющее величину $\xi_c^{(0)}$, приобретает вид $V_d(1)r_0^d n_D \equiv V_d(1)(\xi_c^{(0)} a/2)^d n_D = B_{\text{cr}}(d)$, откуда мы окончательно получаем вид зависимости проводимости от концентрации доноров:

$$\sigma(n_D) \propto e^{-\xi_c^{(0)}(n_D)}, \quad \xi_c^{(0)}(n_D) = \frac{\alpha_d}{n_D^{1/d} a}, \quad \alpha_d = 2[B_{\text{cr}}(d)/V_d(1)]^{1/d}, \quad (227)$$

$$\alpha_3 = 2[3 \cdot 2.7/4\pi]^{1/3} \approx 1.73, \quad \alpha_2 = 2[4/\pi]^{1/2} \approx 2.26 \quad (228)$$

Эти зависимости прекрасно подтверждаются результатами экспериментов.

В сформулированной выше задаче перколяции мы формально считали бесконечными все сопротивления R_{ij} , большие некоторого определенного значения $\tilde{R}$, и разрывали соответствующие связи, постепенно уменьшая $\tilde{R}$ и фиксируя значение $\tilde{R} = R_c$ в тот момент, когда протекание по оставшимся неразорванным связям исчезало. Между тем, в самый этот момент бесконечный кластер из этих оставшихся связей имеет нулевую плотность и бесконечную корреляционную длину $L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ (строгое определение и подробное обсуждение физического смысла корреляционной длины можно найти в моем курсе лекций по теории протекания). Ясно, что проводимость такого критического кластера, строго говоря, равняется нулю – чтобы получить ненулевую проводимость, нужно остановить процесс разрывания связей несколько раньше. Когда? Ясно, что те связи, на которых $R_{ij} > R_c$, но имеет тот же порядок величины, что и $R_{ij} > R_c$, столь же существенны, что и критические связи, для которых $R_{ij} = R_c$. Действительно разорвать следует только те связи, на которых уже $R_{ij} \gg R_c$. “Обогащенный” таким способом бесконечный кластер имеет уже конечную плотность и конечную корреляционную длину. Для того, чтобы их оценить, заметим, что изменение ξ на величину $\Delta\xi \sim 1$ отвечает изменению критического расстояния r между примесями на $\delta r \sim a$, так что относительное изменение $\Delta\xi/\xi \sim a/\bar{r} \ll 1$. Как показано в моем

курсе по теории перколяции, это приводит к результатам

$$P \sim (a/\bar{r})^\beta, \quad L_{\text{corr}}^{(\text{net})} \sim \bar{r}(\bar{r}/a)^\nu \quad (229)$$

Полученная таким образом величина $L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ имеет важный физический смысл: именно на этой длине происходит самоусреднение прыжковой проводимости; на меньших пространственных масштабах возникают экспоненциально большие флуктуации (см. задачу 14.4.2).

14.2 Зависимость от магнитного поля

При наличии магнитного поля волновые функции электронов, связанных на донорах, деформируются, но по-прежнему описываются в рамках квазиклассического приближения, что обеспечивает справедливость формулы (215). Магнитное поле H способно оказать заметное влияние на волновую функцию связанного электрона в основной области $r \sim a$ (а значит, и на энергию связи E_0) только если $\lambda \lesssim a$, где

$$\lambda = (c\hbar/eH)^{1/2} \quad (230)$$

магнитная длина. В противном случае поправки к указанным выше величинам будут малы. Это, однако, несправедливо в отношении хвостов волновой функции при $r \gg a$! Здесь, как мы увидим, эффект магнитного поля проявляется уже при значительно меньших полях. Поскольку прыжковая проводимость определяется поведением волновых функций на расстояниях $\sim r_D \gg a$, то магнитосопротивление оказывается большим уже при полях, где магнитными поправками к энергии еще можно пренебрегать. Именно эту область полей мы и будем рассматривать ниже.

В режиме NNH все опять сводится к перколяционной задаче типа рассмотренной в предыдущем разделе, но с величиной $\xi_{ij} = 2\tilde{S}(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_i)$, модифицированной магнитным полем. Поэтому мы начнем с вычисления этой величины.

Классическое действие $\tilde{S}$ удобнее всего сначала вычислить при положительных энергиях $E_0 > 0$, а затем сделать аналитическое продолжение на отрицательные энергии $E_0 < 0$. Калибровку вектор-потенциала выберем в виде $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}[\mathbf{H} \times \mathbf{r}]$, ось z направим вдоль магнитного поля, а ось x направим перпендикулярно вектору $\mathbf{r}$ так, что $r_x = 0$. Тогда решение уравнения движения электрона в магнитном поле

$$m\ddot{\mathbf{r}} = \frac{e}{c}[\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{H}] \quad (231)$$

будет иметь решение

$$x(t') = \left(\frac{2E_0}{m}\right)^{1/2} \frac{\sin \varphi}{\omega} \left\{ \cos \omega \left(t' - \frac{t}{2}\right) - \cos \frac{\omega t}{2} \right\}, \quad (232)$$

$$y(t') = - \left(\frac{2E_0}{m}\right)^{1/2} \frac{\sin \varphi}{\omega} \left\{ \sin \omega \left(t' - \frac{t}{2}\right) + \sin \frac{\omega t}{2} \right\}, \quad (233)$$

$$z(t') = \left(\frac{2E_0}{m}\right)^{1/2} t' \cos \varphi, \quad (234)$$

где

$$\omega = eH/mc = \frac{\hbar}{m\lambda^2} \quad (235)$$

ларморовская частота, а φ – угол между скоростью электрона и осью z .
Неизвестные величины t и φ должны быть найдены из условий

$$y(t) = r_y, \quad z(t) = r_z, \quad (236)$$

оставшиеся условия $x(0) = y(0) = z(0) = x(t) = 0$ выполняются автоматически. Вычисление действия дает

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{r}, \mathbf{H}) &= -\frac{i}{\hbar} \left\{ 2E_0 t + \int_0^t \mathbf{A}(\mathbf{r}(t')) \dot{\mathbf{r}}(t') dt' \right\} = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \frac{2E_0}{\omega} \left\{ \omega t + \frac{\sin^2 \varphi}{2} (\sin \omega t - \omega t) \right\}. \end{aligned} \quad (237)$$

Переходя к отрицательной энергии $E_0 < 0$ и мнимому времени $t = -i\tau/\omega$, получаем

$$\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = 2\tilde{S}(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = \frac{4|E_0|}{\hbar\omega} \left\{ \tau + \frac{\sin^2 \varphi}{2} (\text{sh} \tau - \tau) \right\}, \quad (238)$$

где τ и φ неявно определяются уравнениями

$$r_z = \left(\frac{2|E_0|}{m\omega^2}\right)^{1/2} \tau \cos \varphi, \quad (239)$$

$$r_y = \left(\frac{2|E_0|}{m\omega^2}\right)^{1/2} 2\text{sh} \frac{\tau}{2} \sin \varphi. \quad (240)$$

Интересно отметить, что сама полученная нами классическая траектория туннелирования в магнитном поле (а не только время движения t)

оказалась комплексной: ее компоненты $z(t)$ и $y(t)$ остались вещественными, а $x(t)$ стала мнимой. Это не совсем обычно: в одномерном туннелировании траектория остается вещественной. Тем не менее, наш результат ничему не противоречит. Во-первых, при входе под барьер и при выходе из-под него мнимая часть траектории обращается в ноль ($x(0) = x(\tau) = 0$), что позволяет комплексной подбарьерной траектории непрерывно сплестись с вещественной траекторией в классически доступной области. Во-вторых, квазиклассический метод по своему смыслу есть не что иное, как метод перевала в фейнмановском интеграле по траекториям. Решение уравнения на перевальную точку (т.е., на перевальную траекторию в нашем случае) совсем не обязано быть вещественным.

Форма найденного выше решения также позволяет разрешить следующую парадокс, возникающий при размышлении о туннелировании в магнитном поле. Как мы прекрасно знаем из классической механики, магнитное поле заворачивает траектории, частица движется по окружности и не может отойти от исходной точки на расстояние, большее удвоенного ларморовского радиуса $2R_L$ (речь идет о движении в направлении, перпендикулярном полю). Если представлять себе подбарьерные траектории также в виде окружностей, то совершенно непонятно, как можно протуннелировать на расстояние, большее, чем $2R_L$. Правильный ответ на этот вопрос выглядит следующим образом: под барьером в магнитном поле частица движется не по дуге окружности, а *по дуге гиперболы* (т.к. тригонометрические функции в выражениях (232), (233) заменяются на гиперболические), а, двигаясь по подходящим образом направленной гиперболе, можно добраться до любой, сколь угодно далекой точки. Нужно, правда, не забывать о том, что эта гипербола – комплексная, как уже говорилось выше.

В принципе, уравнения (238,239,240) полностью решают задачу определения величины $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H})$. Эта величина оказывается зависящей не только от абсолютной величины, но и от направления вектора $\mathbf{r}$. В общем случае эти уравнения не поддаются аналитическому решению (но легко решаются численно). Аналитические результаты можно получить в случае сравнительно слабого поля $H \ll H_c$ (см. задачу 14.4.3)

$$\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) \approx \frac{2r}{a} \left\{ 1 + \frac{\rho^2 a^2}{24\lambda^4} \right\} \quad (241)$$

где ρ – проекция вектора $\mathbf{r}$ на плоскость, перпендикулярную вектору $\mathbf{H}$, а

$$H_c = \left(\frac{36\pi}{B_{cr}} \right)^{1/3} \frac{n_D^{1/3} c\hbar}{ea} = 3.47 \frac{n_D^{1/3} c\hbar}{ea} \quad (242)$$

При типичных значениях $\rho \sim r_D$ второе слагаемое в фигурных скобках относительно мало по параметру H/H_c . Нетрудно показать, что в низшем неисчезающем приближении по H/H_c уравнение $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = \xi$ описывает эллипсоид вращения с малым эксцентрисетом.

В случае сильного поля $H \gg H_c$ задача вычисления действия также решается аналитически (см. задачу 14.4.4):

$$\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) \approx \frac{2|r_z|}{a} + \frac{\rho^2}{2\lambda^2} \quad (243)$$

Здесь поверхность постоянного действия представляет собой два склеенных параболоида вращения.

Итак, теперь мы знаем, как устроена фигура $\mathcal{F}_\xi$, поверхность которой задается условием $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{H}) = \xi$. Это позволяет нам сформулировать соответствующим образом модифицированную задачу перколяции:

- В пространстве размерности d случайным образом с концентрацией n_D разбросаны точки. Вокруг каждой точки с координатами $\mathbf{r}_i$ нарисована фигура $\mathcal{F}_\xi^{(i)}$, поверхность которой задается условием $\xi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i, \mathbf{H}) = \xi$.
- Точки i и j связаны, если точка j попадает внутрь фигуры $\mathcal{F}_\xi^{(i)}$ (или, эквивалентно, точка i попадает внутрь фигуры $\mathcal{F}_\xi^{(j)}$).
- Спрашивается, при каком условии в системе имеется бесконечный кластер связанных точек?

Очевидно, перколяционная задача, рассмотренная нами выше для случая нулевого магнитного поля, является частным случаем, отвечающим сферической форме фигуры $\mathcal{F}_\xi$. Решение общей задачи было бы безнадежной затеей, если бы не одно приближенное свойство этого класса задач перколяции. Согласно этому свойству, условие перколяции имеет вид (226) *почти независимо от формы фигуры $\mathcal{F}_\xi$* , то есть ξ_c должно определяться из условия

$$n_D V_{\xi_c} = B_{\text{cr}}(d). \quad (244)$$

где V_ξ – объем фигуры $\mathcal{F}_\xi$. Еще раз подчеркнем, что нетривиальным (и, вообще говоря, приближенным) предположением здесь является независимость величины $B_{\text{cr}}(d)$ от формы фигуры. Это предположение проверялось численно: оно является точным (в главном порядке по полю) в области слабых полей, где форма фигуры $\mathcal{F}_\xi$ является эллипсоидом вращения (см. задачу 14.4.5). В области сильных полей эта фигура представляет собой симметричное выпуклое тело из двух склеенных параболоидов, для которого предположение об инвариантности $B_{\text{cr}}(d)$, строго

говоря, неверно. Однако известно, что для всех выпуклых фигур это предположение, хотя и не является строгим, но выполняется с большой точностью (возможны отклонения в единицы процентов).

Объем V_ξ удобно выразить в терминах двух параметров: L – длины фигуры в направлении поля и D – диаметра ее сечения, перпендикулярного полю, в самом широком месте:

$$V_\xi = \frac{\pi\eta}{6}LD^2, \quad \eta = \begin{cases} 1 & \text{for ellipsoid,} \\ 3/4 & \text{for paraboloid,} \end{cases} \quad (245)$$

Численный фактор η характеризует отличие формы тела от эллипсоидальной. Величина

$$L = \xi a \quad (246)$$

вообще не зависит от поля. Это объясняется тем, что движение в направлении магнитного поля этим полем не возмущается и волновая функция в этом направлении затухает точно так же, как и без поля. В направлении, перпендикулярном полю, происходит сжатие волновой функции, так что D уменьшается с полем:

$$D = \begin{cases} \xi a [1 - (\xi^2/96)(a/\lambda)^4] & \text{for } H \ll H_c, \\ 2\sqrt{2\xi}\lambda & \text{for } H \gg H_c, \end{cases} \quad (247)$$

Подставляя (246) и (247) в (245), мы получаем

$$V_\xi = \begin{cases} \frac{\pi}{6}\xi^3 a^3 [1 - (\xi^2/48)(a/\lambda)^4] & \text{for } H \ll H_c, \\ \pi a \xi^2 \lambda^2 & \text{for } H \gg H_c, \end{cases} \quad (248)$$

Подставляя этот результат в критерий (244), мы приходим к

$$\xi_c = \begin{cases} \xi_c(0) + \frac{B_{cr}a}{24\pi n_D \lambda^4} & \text{for } H \ll H_c, \\ \left(\frac{B_{cr}}{n_D a \lambda^2} \right)^{1/2} & \text{for } H \gg H_c, \end{cases} \quad \xi_c(0) = \frac{\alpha}{n_D^{1/3} a} \quad (249)$$

Итак, мы получили следующие асимптотические зависимости проводимости от магнитного поля:

$$\sigma(H) \propto \exp \left\{ -\xi_c(0)(1 + (H/2H_c)^2) \right\}, \quad \text{for } H \ll H_c \quad (250)$$

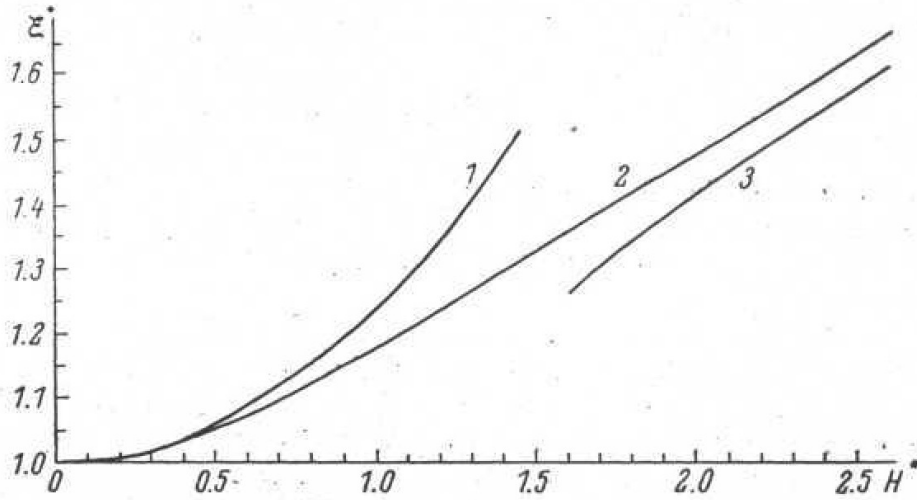


Рис. 10: Зависимость $\xi_* \equiv \ln \sigma(H)/\ln \sigma(0)$ от безразмерного магнитного поля $H_* \equiv H/H_c$, полученная численными методами (1) – асимптотика слабого поля $\xi_* = 1 + H_*^2/4$; (2) – точное решение; (3) – асимптотика сильного поля $\xi_* = \sqrt{H_*}$.

$$\sigma(H) \propto \exp \left\{ -\xi_c(0)(H/H_c)^{1/2} \right\}, \quad \text{for } H \gg H_c \quad (251)$$

Как мы уже отмечали, трансцендентные уравнения (238,239,240) можно решить численно, и получить магнитосопротивление во всей области полей, независимо от соотношения между H и H_c .

Как видно из Рис.10 зависимость $\sigma(H)$ приближается к асимптотике сильного поля довольно медленно.

Полученные выше теоретические результаты непосредственно применимы для описания прыжкового магнитосопротивления полупроводников с невырожденными сферическими зонами, например, n-GaAs или n-InP. На качественном уровне зависимости ξ_c от концентрации и от магнитного поля совпадают с теоретическими.

14.3 Зависимость от температуры

Теперь мы вернемся к вычислению зависящего от температуры вклада $\delta\xi_c$ в величину ξ_c . Напомним, что в интересующей нас области этот вклад относительно мал. В общем случае можно показать, что, если критерий связности имеет вид $\xi_{ij} < \xi$, причем $\xi_{ij} = \xi_{ij}^{(0)} + \delta\xi_{ij}$, где малая поправка $\delta\xi_{ij} \ll \xi_{ij}^{(0)}$ для типичных связей, то для порога перколяции в первом

порядке по возмущениям справедливо равенство

$$\xi_c = \xi_c^{(0)} + \delta\xi_c, \quad \delta\xi_c = \langle \delta\xi_{ij} \rangle \quad (252)$$

где $\xi_c^{(0)}$ – порог перколяции в невозмущенной задаче, а $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по распределению величин $\delta\xi_{ij}$. Соотношение (252) тривиально доказывается в случае, когда $\delta\xi_{ij}$ на разных связях не скоррелированы между собой и все описываются одной и той же функцией распределения, но доказательство может быть обобщено и на случай, когда корреляции присутствуют, но спадают достаточно быстро. Из формулы (252) непосредственно следует, что температурная зависимость прыжковой проводимости по ближайшим соседям описывается законом Аррениуса

$$\sigma \propto \exp\{-E_A/T\}, \quad E_A = \langle E_{ij} \rangle, \quad (253)$$

причем это утверждение справедливо при любой степени компенсации. Впрочем, в интересующем нас случае слабой компенсации использование формулы (252) не требуется, так как флуктуации величины E_{ij} малы. Действительно, пользуясь определением (217), а также вспоминая функцию распределения (210) для величин E_i , мы можем записать:

$$E_{ij} = \mu - E_0 + \delta E_{ij} \quad (254)$$

причем $\langle \delta E_{ij} \rangle = 0$ и $\sqrt{\langle \delta E_{ij}^2 \rangle} \sim \Delta \ll$. В результате, мы получаем энергию активации слабо легированного слабо компенсированного полупроводника в режиме NНН:

$$E_A = \mu - E_0 = 0.61\varepsilon_D. \quad (255)$$

Физическую причину этого результата очень легко понять. В режиме NНН при слабой компенсации подавляющая часть прыжков происходит между парами доноров, расположенных далеко от всех акцепторов (иначе электрону не удалось бы пройти через систему, так что другого выхода просто нет). Это означает, что внутри массива заполненных электронами доноров должны находиться пустые (будем называть их дырками), причем расположены эти дырки в случайных местах вдали от акцепторов. Энергии таких случайных доноров отличаются от E_0 на небольшую случайную с вариацией порядка Δ и, значит, находятся значительно ниже химического потенциала μ . Поэтому для образования (путем термической активации) оторванной от акцептора блуждающей дырки необходимо затратить энергию $E_A = \mu - E_0$.

14.4 Задачи

14.4.1 Корреляционная длина для сетки Миллера-Абрахамса

Рассмотрите прыжковую проводимость в режиме NНН (прыжки по ближайшим соседям). Определите корреляционную длину $L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$, такую, что при $L \gg L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ сопротивления ансамбля образцов с размерами $L \times L$ самоусредняются, а при $L < L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ — испытывают сильные флуктуации от образца к образцу. Пользуясь соображениями теории перколяции, покажите, что $L_{\text{corr}}^{(\text{net})} \sim r_D (r_D/a)^\nu$, где $r_D \gg a$ — среднее расстояние между донорами, a — эффективный боровский радиус, а ν — индекс корреляционной длины в теории перколяции.

Покажите, что если к системе подвести два точечных контакта (с размерами $\ll r_D$) на расстоянии $R \ll L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ друг от друга, то ток потечет по единственной выделенной цепочке из доноров, причем основное падение напряжения будет сосредоточено на единственном, самом длинном, звене этой цепочки. Оцените масштаб флуктуаций сопротивления между точечными контактами.

14.4.2 Флуктуации сопротивления между двумя конечными контактами

Рассмотрим двумерную прыжковую проводимость в режиме NНН. Пусть к системе подведены два контакта в точках a и b на расстоянии $L_{ab} \gg L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$ друг от друга. Контакты имеют вид идеально проводящих дисков радиуса $r \ll L_{ab}$. Интуитивно ясно, что величина сопротивления R_{ab} между этими контактами может зависеть от конкретного расположения примесей и флуктуировать от образца к образцу, отклоняясь от значения $R_{ab}^{(\text{hom})}$, которое получается, если рассматривать систему, как непрерывную среду с удельным сопротивлением R_c . Исследуйте флуктуации величины $\zeta = \ln[(R_{ab} - R_{ab}^{(\text{hom})})/R_c]$ при различных соотношениях между r и $L_{\text{corr}}^{(\text{net})}$.

14.4.3 Подбарьерное действие в слабом поле

Выведите формулу (241)

14.4.4 Подбарьерное действие в сильном поле

Выведите формулу (243)

14.4.5 Задача об эллипсоидах

Докажите, что для случая фигур, имеющих форму одинаково ориентированных эллипсоидов, величина $B_{\text{ст}}$ в задаче перколяции на случайных узлах *в точности совпадает* с той же величиной для случая шаров.

14.4.6 Анизотропия магнитосопротивления

В разделе 14.2 мы показали, что магнитное поле приводит к экспоненциально сильному подавлению проводимости. При этом мы не уточняли, о какой проводимости идет речь: о продольной (когда ток параллелен магнитному полю) или о поперечной (когда перпендикулярен). Разберитесь в этом вопросе и оцените анизотропию проводимости, вызываемую магнитным полем.

14.4.7 Магнитосопротивление в двумерном случае

Найдите экспоненциальную зависимость проводимости от магнитного поля в двумерной системе (поле перпендикулярно плоскости, в которой живут электроны).

15 Прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка. Закон Мотта

При достаточно низкой температуре неравенство (223) нарушается и электрон, при выборе того донора, на который ему следует перепрыгнуть, уже не может руководствоваться только соображениями малости $\tilde{S}$ (т.е., пространственной близости), но должен принимать во внимание величину E_{ij} – стараться, чтобы она была поменьше. Первое, что приходит в голову в этой связи – почему бы не считать, в противоположность режиму NNH, вклад E_{ij} главным:

$$E_{ij}/T \gg \tilde{S}_{ij} \quad (256)$$

и в нулевом приближении решить задачу с $\xi_{ij} = E_{ij}/T$, а затем учесть $\tilde{S}_{ij}$ как поправку по теории возмущений? Эта стратегия, как мы увидим, не проходит буквально, но, тем не менее, здоровое зерно в ней содержится.

15.1 Качественный вывод закона Мотта

Давайте выделим все те “резонансные” доноры i , энергии которых лежат в полоске $\mu - \Delta/2 < E_i < \mu + \Delta/2$. Если взять пару таких доноров ij ,

то, как легко убедиться, для них будет выполнено неравенство $E_{ij} < \Delta$. Поэтому ясно, что ξ_c не может быть больше, чем Δ/T . С другой стороны, казалось бы, никто не запрещает нам выбрать величину Δ такой малой, как мы захотим... Что-то здесь не так!

Дело в том, что, уменьшая Δ , мы уменьшаем концентрацию n_Δ резонансных доноров, лежащих в полоске. В частности, если Δ достаточно мала, а плотность состояний ν_F вблизи поверхности Ферми конечна и слабо меняется, то $n_\Delta = \nu_F \Delta$. Характерное расстояние между донорами в полоске, очевидно

$$r_\Delta \sim n_\Delta^{-1/d} \sim (\nu_F \Delta)^{-1/d} \quad (257)$$

растет с уменьшением Δ и, соответственно, растет типичная величина $\tilde{S}_{ij} \sim r_\Delta/a$. Поэтому неравенство (256) при уменьшении Δ рано или поздно перестанет выполняться. Как же быть?

Не нужно сразу же отказываться от идеи, лучше постараться спасти ее с помощью модификации. Что мы выяснили? Что предложенный способ организации процесса проводимости (с помощью вовлечения в него только тех доноров, которые достаточно близки к уровню Ферми) работает *не всегда*. Да, он отказывается для очень малых Δ – таких, что $r_\Delta/a > \Delta/T$, но для бóльших-то Δ он работает! Это означает, что характерная величина

$$\bar{\xi}(\Delta) \sim \frac{\Delta}{T} + \frac{2r_\Delta}{a} \sim \frac{\Delta}{T} + \frac{(\nu_F \Delta)^{-1/d}}{a} \quad (258)$$

для доноров из полоски шириной Δ сначала уменьшается за счет уменьшения первого – главного – члена в ξ_{ij} , но затем второй – изначально поправочный – член начинает доминировать и $\bar{\xi}$ растет. Поэтому идея об уменьшении Δ совсем не бессмысленна: она работает, но лишь до определенного предела.

Таким образом, мы приходим к следующей идее, принадлежащей Мотту: Главный вклад в проводимость дают прыжки по подсистеме доноров, принадлежащих “моттовской полоске”, т. е., таких, энергии которых лежат в полосе шириной

$$\Delta_M \sim T(T_M/T)^{1/(d+1)}, \quad T_M \sim (\nu_F a^d)^{-1} \quad (259)$$

вблизи уровня Ферми. Величина Δ_M находится из условия минимальности $\bar{\xi}(\Delta)$:

$$\min \bar{\xi}(\Delta) = \bar{\xi}(\Delta_M) \sim (T_M/T)^{1/(d+1)} \quad (260)$$

Результирующая проводимость подчиняется знаменитому закону Мотта

$$\sigma_M \propto \exp\{-(T_M/T)^{1/(d+1)}\} \quad (261)$$

Соответствующий механизм по русски называется “прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка”, по английски – “Variable Range Hopping (VRH)”. В соответствии с формулой (257) длина прыжка растет с уменьшением температуры:

$$r_M \equiv r_{\Delta_M} \sim a(T_M/T)^{1/(d+1)} \quad (262)$$

При низкой температуре в проводимости принимают участие только доноры, энергии которых очень близки к уровню Ферми. В случае слабой компенсации это доноры, расположенные поблизости от акцепторов.

15.2 Перколяционный вывод

Приведенные выше красивые физические аргументы (принадлежащие Мотту) позволяют определить показатель экспоненты проводимости только по порядку величины. Иными словами, если считать формулу (261) определением величины T_M , то (259) является только оценкой, более строго мы должны писать

$$T_M = \beta_d(\nu_F a^d)^{-1}, \quad (263)$$

где β_d – некоторая константа. Чтобы определить ее (и, тем самым, найти численный коэффициент в показателе экспоненты), мы вернемся к общему перколяционному методу решения задачи о сетке Миллера-Абрахамса.

Как мы уже знаем, при низкой температуре основной вклад в проводимость дадут состояния в узкой окрестности уровня ферми, где плотность состояний ν_F можно считать постоянной. Поэтому исходная перколяционная задача формулируется следующим образом:

- В $d + 1$ -мерном пространстве (d координат $\mathbf{r}$ и энергия E) случайным образом набросаны точки с плотностью ν_F
- Две точки i и j считаются связанными, если

$$\xi_{ij} \equiv \frac{2|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}{a} + \frac{|E_i - \mu| + |E_j - \mu| + |E_i - E_j|}{2T} < \xi, \quad (264)$$

- Величина ξ_c отвечает условию возникновения бесконечного кластера связанных точек.

Сделаем преобразование переменных:

$$\mathbf{r}_i = a\xi/2\mathbf{x}_i, \quad E_i - \mu = T\xi\epsilon_i. \quad (265)$$

Это преобразование переводит исходную задачу в следующую:

- В $d + 1$ -мерном пространстве (d координат $\mathbf{x}$ и энергия ϵ) случайным образом набросаны точки с (безразмерной) плотностью $\tilde{\nu} = (a\xi/2)^d T\xi\nu_F$
- Две точки i и j считаются связанными, если

$$\tilde{\xi}_{ij} \equiv |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j| + \frac{1}{2}(|\epsilon_i| + |\epsilon_j| + |\epsilon_i - \epsilon_j|) < 1, \quad (266)$$

- Величина $\tilde{\nu}_c$ отвечает условию возникновения бесконечного кластера связанных точек.

Последняя задача полностью универсальна, она не содержит никаких параметров. Это означает, что универсальным числом должна быть и величина $\tilde{\nu}_c^{(d)}$ – она зависит только от d и ее можно раз и навсегда определить с помощью компьютерной симуляции. В результате мы приходим к следующему уравнению для определения величины ξ_c :

$$(a\xi_c/2)^d T\xi_c\nu_F = \tilde{\nu}_c^{(d)}, \quad (267)$$

откуда воспроизводятся выражения (261), (263) с

$$\beta_d = 2^d \tilde{\nu}_c^{(d)} \quad (268)$$

Численное определение величин $\tilde{\nu}_c^{(d)}$ приводит к значениям

$$\beta_3 \approx 21,2 \quad \beta_2 \approx 13,8 \quad (269)$$

15.3 Задачи

15.3.1 Магнитосопротивление в области VRH

Оцените (с точностью до численного коэффициента в показателе степени) зависимость σ от магнитного поля в области проводимости с переменной длиной прыжка.

16 Влияние подбарьерного рассеяния на прыжковую проводимость с переменной длиной прыжка.

Как мы убедились, при очень низкой температуре электрону оказывается выгоднее туннелировать между резонансными донорами, удаленными друг от друга на расстояние, превышающее $\bar{r}$. В ходе такого туннелирования электрону придется проходить в непосредственной близости от других – нерезонансных – доноров. Как этот факт повлияет на вероятность туннелирования? Расположиться в нерезонансном состоянии “навсегда” электрону не позволяет закон сохранения энергии и низкая температура, однако немного “посидеть и отдохнуть” в нерезонансном состоянии виртуально (т.е., не обращая внимания на закон сохранения энергии), ему позволяет принцип неопределенности. Проще всего этот эффект продемонстрировать на одномерном примере (см. задачу 16.3.1).

В интересующем нас трехмерном случае волновую функцию в точке $\mathbf{r}$ можно записать в виде суперпозиции всех многократно рассеянных волн. Такой способ записи очень напоминает принцип Френеля в оптике, с той только разницей, что здесь он применен к подбарьерному движению, и соответствующие волны не осциллируют а затухают:

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0) &= \psi^{(0)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0) + \sum_{i_1} \psi^{(0)}(\mathbf{r}_{i_1}|\mathbf{r}_0) \lambda_{i_1} \psi^{(0)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_{i_1}) + \\ &+ \sum_{i_1 i_2} \psi^{(0)}(\mathbf{r}_{i_1}|\mathbf{r}_0) \lambda_{i_1} \psi^{(0)}(\mathbf{r}_{i_2}|\mathbf{r}_{i_1}) \lambda_{i_2} \psi^{(0)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_{i_2}) + \dots = \\ &= \sum_{\Gamma} \exp\{-S(\Gamma)\} \prod_{i \in \Gamma} \frac{\ell_i}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|},\end{aligned}\quad (270)$$

где

$$\psi^{(0)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0) = \left(\sqrt{2\pi a} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \right)^{-1} \exp\{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/a\} \quad (271)$$

волновая функция электрона, локализованного на одном рассеивателе, а Γ пробегает все множество путей $\Gamma = \{\mathbf{r}_{i_1}, \mathbf{r}_{i_2}, \mathbf{r}_{i_3}, \mathbf{r}_{i_4}, \dots, \mathbf{r}_{i_N}, \mathbf{r}\}$ ведущих в точку $\mathbf{r}$ по примесям (число N может принимать любое значение от нуля до бесконечности);

$$S(\Gamma) = \frac{1}{a} \sum_{i \in \Gamma} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}| \quad (272)$$

– подбарьерное действие, набираемое частицей, туннелирующей вдоль пути Γ ;

$$\ell_i \equiv \frac{\lambda_i}{\sqrt{2\pi a}} = \frac{8\pi a E_i}{E_0 - E_i}, \quad (273)$$

– длина рассеяния электрона с энергией $E_0 < 0$ на короткодействующем потенциале с уровнем энергии $E_i < 0$. Мы видим, что $\ell_i > 0$, если рассеяние происходит на уровне, более мелком, чем энергия рассеивающегося электрона ($E_0 - E_i < 0$), и наоборот. Поскольку в типичном случае $|E_0 - E_i| \ll |E_0|$, рассеяние является сильным: $|\ell_i| \gg a$. При низкой температуре энергия резонансного состояния E_0 расположена вблизи уровня Ферми E_F . С другой стороны, незаполненные электронами (т.е. заряженные) доноры, на которых только и возможно эффективное рассеяние, все лежат выше E_F . Поэтому для подавляющего большинства эффективных рассеивателей $\ell_i > 0$.

16.1 Слабые флуктуации

Попробуем грубо оценить влияние подбарьерного рассеяния на асимптотику волновой функции на больших расстояниях. Предположим, что типичная ломаная Γ , вносящая вклад в сумму (270), имеет n звеньев, причем вершины этой ломаной уклоняются от прямой, соединяющей точки $\mathbf{r}_0$ и $\mathbf{r}$ на величину $\sim y$. Характерная величина превышения подбарьерного действия $S(\Gamma)$ для такого ломаного пути по сравнению с действием на прямом пути S_0 (длину последнего обозначаем, как $L \equiv |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$)

$$\Delta S(n, y) \equiv (S(\Gamma) - S_0) \sim n \frac{y^2}{aL/n}. \quad (274)$$

Кроме того, вклад каждой такой ломаной содержит множитель $[\ell/(L/n)]^n$. Наконец, число таких ломаных $\sim (M_{\text{sc}}(n, y))^n$, где

$$M_{\text{sc}}(n, y) \sim N_{\text{sc}} \pi y^2 (L/n) \quad (275)$$

– число рассеивателей внутри цилиндра длиной L/a и радиусом y .

Собирая все сомножители, получим для вклада всех траекторий с фиксированными n и y

$$\psi_{n,y}(\mathbf{r}|\mathbf{R}_0) \approx J(n, y) e^{-S_0}, \quad (276)$$

$$J(n, y) \sim \left(\frac{M_{\text{sc}}(n, y) \ell}{(L/n)} \right)^n \exp\left\{-n \frac{y^2}{aL/n}\right\} \approx e^{F(n, y)}, \quad (277)$$

$$F(n, y) = -\frac{n^2 y^2}{aL} + n \ln(N_{\text{sc}} y^2 \ell) \quad (278)$$

Теперь осталось выяснить, какая группа траекторий дает наибольший вклад в волновую функцию, т.е., определить оптимальные значения n и y из условия максимальности функции $F(n, y)$:

$$\frac{\partial F}{\partial n} = -\frac{2ny^2}{aL} + \ln(N_{\text{sc}}y^2\ell) = 0, \quad (279)$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = -\frac{2n^2y}{aL} + \frac{2n}{y} = 0, \quad (280)$$

Решение этих уравнений приводит к

$$\begin{aligned} n_{\text{opt}} \sim N_{\text{sc}}\ell La \sim \frac{BL}{\ell}, \quad y_{\text{opt}} \sim (N_{\text{sc}}\ell)^{-1/2} \sim \frac{\sqrt{\ell a}}{B}, \\ F_{\text{opt}} \sim \frac{BL}{\ell}, \quad M_{\text{sc}} \sim \frac{1}{B}, \end{aligned} \quad (281)$$

где мы ввели безразмерный параметр

$$B \equiv N_{\text{sc}}a^2\ell. \quad (282)$$

Итак, поправка к показателю экспоненты оказалась пропорциональна L , как и основной член S_0 . Это означает, что эффект подбарьерного рассеяния сводится к перенормировке декремента затухания волновой функции:

$$\psi(\mathbf{r}|\mathbf{r}_0) \approx e^{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|/a^*}, \quad a^* = a(1 + Ba/\ell), \quad (283)$$

Относительная величина перенормировки декремента мала, но перенормировка самой волновой функции на больших расстояниях может быть очень сильной.

При каких условиях справедливы полученные выше результаты? Ясно, что оценка числа траекторий (275) справедлива только при $M_{\text{sc}} \gg 1$, т.е., при $B \ll 1$. При этом заметный вклад в волновую функцию вносит большое число различных траекторий, в результате чего она самоусредняется. Чтобы убедиться в этом, вычислим $\delta\psi(\mathbf{r})$ – среднюю флуктуацию $\psi(\mathbf{r})$.

16.2 Сильные флуктуации

Как решать задачу при противоположном условии $B \gg 1$? Ясно, что для того, чтобы существовала хотя бы одна ломаная траектория с параметрами n и y , нужно потребовать $M_{\text{sc}} \geq 1$. При этом число траекторий,

вносящих существенный вклад в волновую функцию, оказывается порядка единицы. В результате получаем $y^2 \sim n/(NL)$ и

$$F(n) = -\frac{n^3}{N_{\text{sc}}aL^2} + n \ln(n\ell/L) \quad (284)$$

Оптимальное значение n находится из условия

$$\frac{dF}{dn} = -\frac{3n^2}{N_{\text{sc}}aL^2} + \ln(n\ell e/L) = 0, \quad (285)$$

которое приводит к результатам

$$\begin{aligned} n_{\text{opt}} &\sim \frac{L}{a} (N_{\text{sc}}a^3)^{1/2} \ln^{1/2} B, \\ F_{\text{opt}} &\sim \frac{L}{a} (N_{\text{sc}}a^3)^{1/2} \ln^{3/2} B, \end{aligned} \quad (286)$$

16.3 Задачи

16.3.1 Подбарьерное рассеяние в одномерном случае.

Электрон связан в одномерной δ -образной яме с энергией $E_0 = -\kappa_0^2/2m$, расположенной в точке $x = 0$. Кроме того, на прямой в точках $x_n = nL$, $n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ расположены другие δ -образные ямы с “нерезонансными” (т.е., достаточно сильно отличающимися от E_0) энергиями $E_n = -\kappa_n^2/2m$. Определите асимптотику волновой функции электрона $\psi(x)$ при $x \gg L$. Найдите функцию распределения для $\psi(x)$, считая E_n независимыми случайными величинами с одинаковой функцией распределения $P(E)$