

Гантмахер В.Ф.

**Электроны в
неупорядоченных
средах**



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ ®

УДК 538.9
ББК 22.37
Г 19

Гантмахер В. Ф. **Электроны в неупорядоченных средах.** — 2-е изд., испр. и доп. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 232 с. — ISBN 978-5-9221-0578-1.

Книга предназначена для студентов старших курсов и аспирантов, специализирующихся в области физики твердого тела, а также для научных сотрудников и всех, кто профессионально нуждается в понимании основ физических процессов, управляющих поведением электронов в твердых телах. Она написана с минимумом математики. Основное внимание уделено обсуждению физической сущности явлений и выявлению глубинных связей и аналогий между ними.

ISBN 978-5-9221-0578-1

© ФИЗМАТЛИТ, 2005
© В. Ф. Гантмахер, 2005

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	5
Литература по разделам физики металлов, не вошедшим в книгу . . .	7
Благодарности	8
Глава 1. Металлы с сильным беспорядком	9
1.1. Дифракционная теория электронного транспорта в жидких металлах	10
1.2. Правило Мооя	15
1.3. Насыщение сопротивления	17
1.4. Предел Иоффе–Регеля при большой электронной плотности . .	21
Глава 2. Квантовые поправки к проводимости	24
2.1. Слабая локализация	25
2.2. Влияние магнитного поля на слабую локализацию	32
2.3. Антилокализация	36
2.4. Межэлектронная интерференция	42
Глава 3. Влияние межэлектронного взаимодействия на электронный энергетический спектр	50
3.1. Переход Пайерлса	50
3.2. Структура примесной зоны при слабом легировании	52
3.3. Кулоновская щель	59
Глава 4. Прыжковая проводимость	64
4.1. Локализованные состояния и переходы между ними	64
4.2. Прыжки на ближайшие центры	67
4.3. Прыжки с переменной длиной прыжка	70
4.4. Экспериментальные наблюдения прыжковой проводимости . . .	73
Глава 5. Переходы металл–изолятор	80
5.1. Переход Андерсона	81
5.2. Формула Ландауэра для одномерных (1D) систем	85
5.3. Локализация и роль корреляций в 1D-системах	89
5.4. Микроволновое моделирование	95
5.5. Модель структурного беспорядка	98
5.6. Переход Мотта	101
5.7. Минимальная металлическая проводимость?	106
Глава 6. Скейлинговая гипотеза	109
6.1. Обоснование и формулировка скейлинговой гипотезы	109
6.2. Трехмерные (3D) системы	114

6.3. Двумерные (2D) системы	121
6.4. Скейлинг и спин-орбитальное взаимодействие	127
Глава 7. Химическая локализация	130
7.1. Интерметаллические комплексы в двухкомпонентных расплавах	131
7.2. Квазикристаллы	137
7.3. Переход металл–изолятор при большой электронной плотности	143
Глава 8. Гранулированные металлы	145
8.1. Морфология и классификация	145
8.2. Кулоновская блокада и переход металл–изолятор	151
8.3. Фрактально-гранулированные металлы	158
Глава 9. Целочисленный квантовый эффект Холла	164
9.1. Спектр и динамика двумерных электронов в сильном магнитном поле	165
9.2. Экспериментальные наблюдения целочисленного КЭХ	173
9.3. Механизм образования плато	177
9.4. Краевые каналы	184
9.5. Плотность состояний электронного 2D-газа в магнитном поле .	189
9.6. Цепочки фазовых переходов	192
9.7. Двухпараметрический скейлинг	198
Приложение А. Элементы теории перколяции	206
А.1. Аппроксимация эффективной среды	206
А.2. Перколяционные пороги	209
А.3. Окрестность перколяционного перехода	213
А.4. Пример: электропроводность сильно неоднородной среды	215
Приложение Б. Туннельные характеристики	219
Указатель материалов	230
Предметный указатель	231

Предисловие

Книга, которую вы держите в руках, это скорее не учебник, а путеводитель. Как известно, путеводитель не может заменить путешествие. Но он подсказывает, куда следует повернуть, где задержаться, на что обратить внимание, над чем задуматься. Когда вы находитесь в стране с незнакомым языком, путеводитель должен быть еще и разговорником, подсказывая, как спросить дорогу или как понять надпись на указателе.

Путеводитель должен начинаться с обзорной карты. Роль карты для страны «Электроны в неупорядоченных средах» выполняет схема-оглавление, разъясняющая логику «административного деления», специализацию и внутренние связи между главами-«провинциями». Их всего одиннадцать (в первом издании было десять — здесь добавлена глава о квантовом эффекте Холла; кроме того, в гл. 5 добавлены параграфы об одномерных системах. Остальные изменения незначительны). Помимо девяти естественных исторически сложившихся «провинций», которые обозначены белыми прямоугольниками, на карте имеются еще две, закрашенные серым, появившиеся в соответствии с «методическим принципом» и вынесенные в приложение. Раздел «Элементы теории перколяции» представляет собой краткое изложение основных понятий этой математической дисциплины. Появился здесь он потому, что эта молодая теория, хотя и широко используется, до сих пор не включена в университетские курсы математики. В разделе «Туннельные характеристики» описаны эксперименты, имеющие непосредственное отношение одновременно к самым различным обсуждаемым явлениям: межэлектронной интерференции, кулоновской щели, прыжковой проводимости, переходам металл-изолятор. Выделение этого материала в отдельный раздел позволяет избежать повторений. Предполагается, что читатель, единожды разобравшись с сутью эксперимента, будет возвращаться в этот раздел из разных мест, чтобы посмотреть на экспериментальные кривые. Специальные значки, смысл которых нетрудно понять, показывают, в каких разделах используются сведения, собранные в обоих приложениях.

На обзорную карту обычно наносят и сопредельные территории. У нас они окрашены в желтый цвет. Указаны и средства сообщения с ними: по названию в конце Предисловия можно найти соответствующие ссылки на учебную и обзорную литературу. Предполагается, что читатель знает и понимает то, что подразумевается под «Электронами в идеальной решетке», «Транспортом в τ -приближении» и «Рассеянием» или в крайнем случае может воспользоваться соответствующими учебниками. Знакомство со сверхпроводимостью или с волнами зарядовой плотности, вообще говоря, не обязательно.

Карта сама несет информативную нагрузку, являясь чем-то большим, чем просто оглавлением. При этом следует помнить, что, поскольку страна виртуальная, то карта субъективна: подобно географическим картам древности, ее вид зависит от вкусов и взглядов составителя.

На предлагаемой карте не указана большая сопредельная территория, которая называется «Взаимодействующие электроны». Это страна будущего. Многие открытия в ней, ее освоение, прокладывание дорог и застройка еще только предстоят. По существу «Сверхпроводимость» с ее куперовскими парами и эффектом Джозефсона и «Двумерный электронный газ» с дробным квантовым эффектом Холла и композитными фермионами — это окраинные провинции этой страны, освоенные одна более, другая менее. Возможно, что в названии этой книги следовало бы написать «невзаимодействующие электроны...». Но это было бы тоже неточно, потому что кулоновское межэлектронное взаимодействие в ней обсуждается довольно активно. Оно является существенным для кулоновской щели, переходов Пайерлса и Мотта, и других разделов, которые можно легко определить по пунктирным стрелкам на карте. Но проблемы межэлектронного взаимодействия не исчерпываются законом Кулона. Эту книгу можно рассматривать как плацдарм для их изучения.

Однако, надо иметь в виду, что и плацдарм еще освоен не до конца. Вам предстоит путешествие по сравнительно новой и развивающейся стране. В одних местах строительство в основном завершилось, и пейзаж вряд ли изменится в будущем. В других можно оказаться на стройплощадке или на территории, подлежащей реконструкции, так что через несколько лет многое будет выглядеть не так, как сейчас.

Особенности предмета «Электроны в неупорядоченных средах» в том, что нет ни одного большого учебника, в котором он был бы целиком описан. Поэтому по ходу изложения мы указываем книги, обзоры, а иногда даже оригинальные статьи, где соответствующий материал изложен наиболее просто и понятно (а этот выбор опять-таки весьма субъективен). Такая система ссылок ни в какой мере не отражает приоритетов в получении новых результатов. Например, любой график с экспериментальными результатами сопровождается ссылкой на оригинальную работу, чтобы можно было посмотреть детали эксперимента. Но сами результаты отбирались по принципу «зрелищности» и могут быть не первыми по времени. Теоретические работы, содержащие новые оригинальные результаты, часто мало пригодны для первого ознакомления с предметом из-за сложного математического аппарата. Такие работы здесь тоже не упоминаются. Но встречаются ссылки на работы, содержащие простые наглядные модели, не получившие дальнейшего развития и не вошедшие в обзоры.

Засим, счастливого пути! Рекомендуем двигаться по жирным красным стрелкам, придерживаясь преимущественного направления слева направо. Двухсторонние пунктирные стрелки указывают на внутренние взаимосвязи, а сплошные — на связи с внешним миром. Одного канонического маршрута нет. Каждому — по потребностям.

Литература по разделам физики металлов, не вошедшим в книгу

Электроны в идеальной решетке

1. *Абрикосов А. А.* Основы теории металлов. — М.: Наука, 1987.
2. *Ашкрофт Н., Мермин Н.* Физика твердого тела. — М.: Мир, 1979. (перевод книги *Ashcroft N. W., Mermin N. D.* Solid State Physics. — Holt, Rinehart and Winston, 1969).
3. Физика металлов. 1. Электроны (ред. Дж. Займан). — М.: Мир, 1972 (перевод книги *The physics of metals. 1. Electrons* (ed. J. Ziman). — Cambridge Univ. Press, 1969).

Транспорт в τ -приближении и рассеяние

4. *Абрикосов А. А.* Основы теории металлов. — М.: Наука, 1987.
5. *Гантмахер В. Ф., Левинсон И. Б.* Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. — М.: Наука, 1984.

Волны спиновой и зарядовой плотности

6. *Уайт Р., Джебелл Т.* Дальний порядок в твердых телах. — М.: Мир, 1982 (перевод книги *White R. M., Geballe T. H.* Long range order in solids. — Academic Press, 1979).
7. *Grüner G.* Density Waves. — Perseus Books, 2000.
8. *Grüner G.* // *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129 (1988); **66**, 1 (1994).

Сверхпроводимость

9. *Абрикосов А. А.* Основы теории металлов. — М.: Наука, 1987.
10. *Шмидт В. В.* Введение в физику сверхпроводников. — М.: Наука, 1982; 2-е изд. — М.: МЦНМО, 2000.

Двумерный электронный газ

11. *Демиховский В. Я., Вугальтер Г. А.* Физика квантовых низкоразмерных структур. — М.: Логос, 2000.
12. *Physics of low dimensional structures* (ed. B. Butcher, N.H. March, M.P. Tosi). — Plenum Press, 1993.

Благодарности

Эта книга возникла из курса, который автор читал в течении ряда лет студентам Московского физико-технического института и Московского государственного университета. Все слушатели курса своими вопросами на лекциях и ответами на экзаменах способствовали его оптимизации. Автор благодарен Ю. Гальперину, В. Долгополову, Э. Рашбе и С. Студеникину, прочитавшим рукопись и сделавшим много ценных замечаний. Особая благодарность Д. Хмельницкому, дискуссии с которым привели к уточнению многих утверждений и даже к появлению новых параграфов. При написании главы про квантовый эффект Холла автор пользовался советами и разъяснениями В. Долгополова и С. Мурзина.

Глава 1

МЕТАЛЛЫ С СИЛЬНЫМ БЕСПОРЯДКОМ

Основным фактором, определяющим законы движения делокализованных электронов в кристаллах, является дальний порядок. Именно он обеспечивает в кристалле интерференцию после рассеяния электронов от отдельных атомов, которая полностью гасит рассеяние и допускает стационарное распространение электронных волн почти со всеми волновыми векторами \mathbf{k} . Исключения составляют лишь волны, у которых волновой вектор удовлетворяет условию

$$k^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{K}_m)^2, \quad (1.1)$$

где \mathbf{K}_m — произвольный вектор обратной решетки. Для электронов с такими волновыми векторами рассеяние является резонансным и такие электронные волны вообще не могут распространяться в кристалле. Все же остальные электроны рассеиваются лишь на отклонениях от периодичности, что учитывается понятием длины свободного пробега l . В таком контексте l имеет смысл расстояния, которое электрон проходит между двумя последовательными независимыми актами рассеяния. Естественно, что рассеяние должно быть не слишком частым, чтобы длина l была больше электронной длины волны $\lambda \approx 2\pi/k_F$:

$$k_F l > 1. \quad (1.2)$$

Под k_F здесь подразумевается радиус ферми-сферы

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3}, \quad (1.3)$$

определяемый через концентрацию свободных носителей n . Ограничение снизу на длину пробега $l \gtrsim 1/k_F$ называют пределом Иоффе–Регеля. Обоснование этого неравенства, заимствованное из классической физики, звучит так: отрезок синусоиды размером меньше длины волны уже нельзя считать синусоидой. Квантовомеханический аргумент, по сути дела аналогичный, исходит из соотношения неопределенности $\Delta k \Delta x \sim 1$. Поскольку Δk заведомо меньше k_F , минимально возможная неопределенность траектории электрона $\Delta x \gtrsim 1/k_F$. Естественно, что расстояние между двумя актами рассеяния вдоль этой траектории должно быть больше этой неопределенности.

В этой главе мы будем полагать, что имеем дело с «настоящими» металлами, у которых концентрация n такова, что среднее расстояние между носителями порядка среднего расстояния между атомами a

$$n^{-1/3} \lesssim (n^*)^{-1/3} = a \approx 3 \text{ \AA}, \quad n \gtrsim 4 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}. \quad (1.4)$$

Такой металл мы будем называть стандартным. В веществах со столь большой электронной плотностью при наличии дальнего порядка ферми-поверхности обычно имеют довольно сложную форму. Однако для оценок всегда можно пользоваться моделью ферми-сферы (1.3).

Длину пробега l можно оценить из величины удельной проводимости σ . Подставив ферми-радиус (1.3) в выражение для σ , получим формулу Друде

$$\sigma = \frac{ne^2l}{\hbar k_F} = (3\pi^2)^{-2/3} \frac{e^2}{\hbar} n^{1/3} (k_F l). \quad (1.5)$$

Согласно неравенству Иоффе–Регеля (1.2), минимальное значение безразмерного параметра $k_F l$ равно единице. Тогда из (1.5) следует, что удельное сопротивление не может быть больше, чем $\rho^* \approx \approx 10(\hbar/e^2)a$. Конечно, получающееся из соотношения (1.5) численное значение $\rho^* \approx 1000$ мкОм·см весьма приблизительно и его следует уточнить экспериментально. Как мы увидим (см. ниже, рис. 1.3), из экспериментов следует значение ρ^* для стандартного металла

$$\rho^* \approx (200 \div 300) \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \quad (1.6)$$

которым мы и будем пользоваться.

Само существование предельного значения ρ^* позволяет поставить два вопроса.

1. Каковы транспортные свойства сильно разупорядоченного стандартного металла при большом ρ , которое тем не менее $\rho < \rho^*$?

2. Нельзя ли преодолеть предел ρ^* и изготовить стандартный металл с $\rho > \rho^*$? В простейшей модели (1.5) это бы означало, что $l < a$, т. е. что электрон заперт и двигается в пределах одной элементарной ячейки или вблизи одного атома и что металл превратился в изолятор. Переход металл–изолятор под влиянием беспорядка известен (переход Андерсона), но он всегда наблюдается в системах с электронной плотностью, существенно меньшей, чем (1.4). Поэтому второй вопрос можно переформулировать так: возможен ли переход Андерсона в системах с большой электронной плотностью (1.4)?

В этой главе мы обсудим первый вопрос и начнем обсуждение второго, а завершим это обсуждение в гл. 7.

1.1. Дифракционная теория электронного транспорта в жидких металлах ¹⁾

Когда статические дефекты периодической решетки расположены далеко друг от друга, рассеяние на каждом из них происходит независимо. При постепенном увеличении концентрации дефектов их потенциалы должны начать перекрываться. Тогда в пространстве уже нельзя выделить области, свободные от рассеивающих полей, и четко указать, где какой статический дефект ответственен за рассеяние.

¹⁾ Материал этого параграфа обсуждается также в книгах [1] и [2].

Увеличение беспорядка требует разработки нового подхода для описания его последствий. Такой подход предложен в теории жидких металлов Займана.

В жидкости сохраняется только ближний порядок: ближайшее окружение каждого атома расположено почти так же, как в кристалле. Но именно из-за этого «почти» при переходе к атомам, более удаленным от исходного, неопределенность их расположения относительно исходного атома нарастает, так что дальний порядок отсутствует. Казалось бы при отсутствии дальнего порядка, когда каждый атом рассеивает независимо, условие (1.2) должно нарушиться. Однако довольно часто, в частности в монокристаллических жидких металлах, это не так. Об этом свидетельствует величина удельного сопротивления $\rho = 1/\sigma$. В формуле (1.5) выразим концентрацию носителей n через валентность Z , т. е. число свободных электронов на атом, и концентрацию атомов $N = 1/a^3$, определяемую из удельного веса расплава. Благодаря этим соотношениям, из величины удельной проводимости непосредственно определяется отношение l/a . В большинстве монокристаллических жидких металлов это отношение больше 5, а в щелочных металлах даже больше 100 (кроме Li, у которого $l/a \approx 13$). Это означает, что сечение рассеяния на отдельных атомах не очень большое, в несколько раз меньше, чем a^2 . Причина ослабленного рассеяния — в большой электронной плотности и, как следствие, в сильном экранировании. Каждый электрон чувствует не истинный потенциал иона, а лишь его перенормированную малую часть, сохранившуюся после экранирования остальными электронами. Этот остаток называется псевдопотенциалом, и в дальнейшем в этом параграфе речь будет идти только о нем, хотя приставку «псевдо» мы будем для краткости опускать.

Излагаемая теория описывает рассеяние электронов на слабом, но протяженном хаотическом потенциале. Специфика задачи в том, что рассеивателем является потенциал $V(\mathbf{r})$, охватывающий весь объем. При этом предполагается, что энергетический спектр изотропен и энергия электрона зависит только от модуля его волнового вектора: $\varepsilon = \varepsilon(k)$, а волновые функции имеют вид немодулированных плоских волн $\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. При таких волновых функциях матричный элемент перехода

$$\int \psi_2^* V(\mathbf{r}) \psi_1 d\mathbf{r} = \int e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = V(\mathbf{q}) \quad (1.7)$$

есть фурье-компонента рассеивающего потенциала с аргументом, равным изменению волнового вектора при рассеянии: $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$. Потенциал $V(\mathbf{r})$ складывается из потенциалов отдельных атомов $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, расположенных в точках \mathbf{R}_i :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_i} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (1.8)$$

Соответственно, фурье-компонента потенциала $V(\mathbf{r})$

$$V(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R}_i} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) d\mathbf{r} = \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} v(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = v(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \quad (1.9)$$

выражается через фурье-компоненту потенциала отдельного атома $v(\mathbf{q})$.

Заметьте. Форма записи (1.8) потенциала $V(\mathbf{r})$ предполагает, что остовы различных ионов перекрываются не очень сильно, т. е. что нет пар с очень малыми расстояниями $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$.

Сравните. Формально точно такой же потенциал фигурирует и в модели структурного беспорядка, обсуждаемой в гл. 5 в связи с переходами Андерсона. Но там у потенциала нет приставки «псевдо», ямы $v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$ глубокие, и электроны могут в принципе сидеть каждый в своей яме.

Поскольку вероятность рассеяния выражается через квадрат матричного элемента, нужно вычислить квадрат $V^2(\mathbf{q})$. Пусть объем, занимаемый жидким металлом, равен единице, а концентрация ионов — N . Тогда

$$|V(\mathbf{q})|^2 = |v(\mathbf{q})|^2 \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} = |v(\mathbf{q})|^2 \left(N + \sum_{\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j, i \neq j} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \right). \quad (1.10)$$

Последнее преобразование справедливо благодаря тому, что все N диагональных элементов $i = j$ двойной суммы равны 1. Зафиксируем некоторый ион $j = j_0$, перенесем начало координат в точку \mathbf{R}_{j_0} и усредним сумму

$$\sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{j_0})} \equiv \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}'_i}, \quad \mathbf{R}'_i = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{j_0},$$

по всем возможным конфигурациям $\{\mathbf{R}_i\}$. Тогда суммирование по \mathbf{R}_j можно заменить умножением на N . Обозначив результат усреднения чертой сверху, получим

$$\overline{|V(\mathbf{q})|^2} = |v(\mathbf{q})|^2 N \left(1 + \overline{\sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}} \right) = |v(\mathbf{q})|^2 NS(q). \quad (1.11)$$

Выражение в скобках, обозначенное $S(q)$, называется структурным фактором. Для преобразования $S(q)$ и выяснения его физического смысла введем вероятность $NP(r)d^3r$ нахождения иона в объеме d^3r при условии, что другой ион находится в начале координат $r = 0$; интеграл по единичному объему $\int P(r)d^3r = 1$. Если положения всех ионов статистически независимы, то $P(r) \equiv 1$. Наличие спадающих с r корреляций ближнего порядка отражается на значениях P при значениях r порядка a , а при $r \rightarrow \infty$ всегда функция $P(r) \rightarrow 1$. Из-за

этого фурье-образ $P(q)$ функции $P(r)$ содержит сингулярность в виде дельта-функции: $P(q) = \delta(q) + P'(q)$, где $P'(q)$ — функция, регулярная в точке $q = 0$. Но родственная $P(r)$ парная корреляционная функция $Q(r) = P(r) - 1$, которая на больших r стремится к нулю, не имеет этого недостатка.

Заменим в определении (1.11) структурного фактора $S(q)$ сумму, усредненную по всем позициям атомов \mathbf{R}_i , на интеграл по d^3r , в котором вероятность $P(r)$ является весовым множителем. С точностью до дельта-функции, на которую различаются фурье-образы функций $P(r)$ и $Q(r)$, имеем

$$\begin{aligned} S(q) &= 1 + \overline{\sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}} = 1 + N \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} Q(r) d^3r = \\ &= 1 + 2\pi N \int \int e^{iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta Q(r) r^2 dr = \\ &= 1 + 4\pi N \int_0^\infty Q(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr. \quad (1.12) \end{aligned}$$

Функция $S(q)$ появляется во всех дифракционных задачах, в частности, в задачах о рассеянии нейтронов и рентгеновских лучей, и может быть извлечена из соответствующих экспериментов. Как и $P(r)$, она содержит всю информацию о корреляциях в положениях ионов. Появление здесь этой функции подчеркивает, что весь подход базируется на предположении, что волновые функции электронов — это плоские волны. Поэтому эту теорию часто называют спектральной или дифракционной теорией транспорта в жидких металлах.

Обычный вид функции $S(q)$ показан на рис. 1.1: после нескольких затухающих осцилляций она выходит на асимптоту $S = 1$. Масштаб этих осцилляций по оси ординат зависит от корреляций: чем они слабее, тем амплитуда осцилляций меньше. Для системы со статистически независимыми положениями ионов $S(q) = 1$. Масштаб по оси абсцисс задается средним расстоянием между ионами $a \approx N^{-1/3}$. Значение аргумента в первом максимуме определяется радиусом a_1 первой координационной сферы $1/q_1 \approx a_1 \approx a$. Аналогично $1/q_2 \approx a_2 \approx 2a$ и т. д. Благодаря этому, из соотношений (1.5) следует, что на оси абсцисс можно указать точки $q = 2k_F$ для различных Z (вертикальные пунктирные линии на рис. 1.1) и их расположение относительно максимумов функции $S(q)$. Именно это позволило сделать

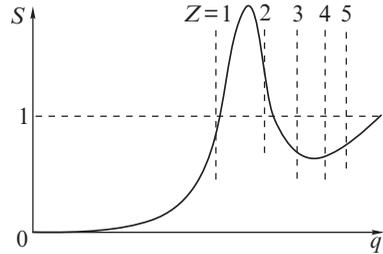


Рис. 1.1. Схематический график функции $S(q)$, на котором отмечены величины $2k_F$ при разном количестве Z свободных электронов на атом

из теории нетривиальные выводы, поддающиеся экспериментальной проверке.

Как известно, входящая в формулу (1.5) величина l аккумулирует результаты всех актов упругого рассеяния $|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2| = k_F$ на разные углы $\theta = 2 \arcsin(q/2k_F)$ (см. рис. 1.2) в соответствии с формулой

$$\frac{1}{l} \propto \int_0^\pi \overline{|V(q)|^2} (1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta \propto \int_0^1 S(2k_F x) v^2(2k_F x) x^3 dx, \quad (1.13)$$

$$x = \frac{q}{2k_F}.$$

Из-за множителя x^3 в подинтегральном выражении в (1.13) основной вклад в интеграл вносит область $x \approx 1$, т. е. рассеяние «почти назад» на углы $\theta \approx \pi$. Это означает, что при вычислении величины $1/l$ существенно не вся функция $S(q)$, а лишь ее значения в окрестности точки $q = 2k_F$ (см. рис. 1.1). Отсюда следует чрезвычайно сильное и элегантное утверждение.

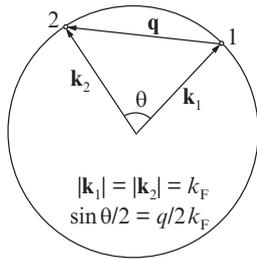


Рис. 1.2. К формуле (1.13): связь между углом упругого рассеяния θ и модулем переданного импульса q

Очевидно, что при повышении температуры корреляции ослабевают и система ионов становится все более хаотичной. Поэтому значения функции $S(q)$ при каждом фиксированном q с ростом температуры приближаются к единице. Как видно из рис. 1.1, в металлах с $Z = 1$ (жидкие Na, K, Rb) и $Z = 3$ (Al, Ga, In) величина $S(2k_F)$ при этом будет расти, а в металлах второй группы с $Z = 2$ (жидкие Zn, Cd, Hg) — уменьшаться. Соответственно по-разному должны меняться с температурой

величина $1/l$ и пропорциональное ей удельное сопротивление ρ . Таким образом, дифракционная теория предсказывает нетривиальную зависимость от валентности знака температурного коэффициента сопротивления жидких металлов: у щелочных и трехвалентных металлов сопротивление должно расти с ростом температуры, а у двухвалентных — падать. Как видно из табл. 1.1, где приведены данные о температурном коэффициенте сопротивления для ряда металлов, дело именно так и обстоит. (Все металлы, фигурирующие в таблице, имеют сравнительно низкие температуры плавления: ниже 200°C у всех, кроме Zn (420°C) и Cd (320°C).)

Почутилен еще один аспект результатов, получающихся в дифракционной теории. Оказалось, что увеличение беспорядка может приводить к уменьшению сопротивления. Необходимой предпосылкой для этого является перекрытие отдельных рассеивателей, эффект от которых был бы аддитивен, будь они изолированы. Кроме того существенно, чтобы тепловые фононы добавлялись к фону сильного

Таблица 1.1

Металл	Валентность	ρ , мкОм · см	$\frac{d \ln \rho}{d \ln T}$
Li	1	25	0,6
Na	1	10	0,85
K	1	13	0,76
Rb	1	22	0,70
Cs	1	37	0,69
Zn	2	37	-0,24
Cd	2	34	-0,22
Hg	2	91	-0,10
Ga	3	26	0,14
In	3	33	0,16

статического беспорядка, который уже разрушил дальний порядок и анизотропию. Однако весьма примечателен сам факт наличия такого эффекта, получаемого в рамках приближения кинетического уравнения.

Заметьте. Рост сопротивления с понижением температуры происходит также в условиях слабой локализации (см. гл. 2). Но там он обусловлен квантовыми поправками к проводимости, которые появляются за пределами приближения кинетического уравнения.

1.2. Правило Моойа

Успех дифракционной теории показывает, что можно по-прежнему опираться и ссылаться на величину параметра l даже тогда, когда l уже трудно назвать расстоянием, которое электрон проходит между двумя последовательными точечными актами рассеяния. Из хода вычислений скорее следует, что рассеяние при сильном беспорядке представляет собой как бы непрерывный процесс, количественно оцениваемый длиной l . В этих условиях решающее значение приобретает значение безразмерного параметра $l/a \approx k_{\text{F}}l$.

Блестящее подтверждение выводов дифракционной теории в монокристаллических металлических расплавах привело к тому, что эту теорию стали широко применять при обработке данных по электросопротивлению разупорядоченных высокоомных металлических сплавов по следующей схеме: по знаку температурного коэффициента сопротивления определяется среднее количество носителей на атом, что далее используется как аргумент при определении электронного спектра, перекрытия зон, положений ферми-уровня и т. д. Оказалось, однако, что во многих случаях простейшие оценки по формулам (1.5) показывают, что $l \lesssim a$. Тогда плоские волны являются плохой аппроксимацией волновых функций и применение дифракционной теории становится неправомерным.

В этих условиях следует обратиться в первую очередь к эксперименту. На рис. 1.3 собраны данные о температурном коэффициенте сопротивления $\bar{\alpha} = R^{-1} (dR/dT)$ высокорезистивных металлических сплавов для более ста различных материалов (величина $\bar{\alpha}$ имеет размерность обратной энергии). На основании этих данных был сделан вывод о существовании корреляции между величиной удельного сопротивления и температурным коэффициентом сопротивления и сформулировано эмпирическое правило Мооя: *Металлические ма-*

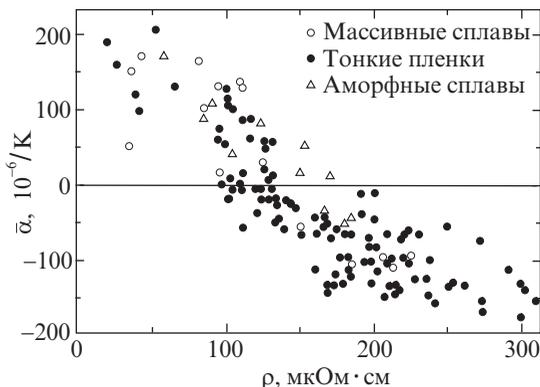


Рис. 1.3. Правило Мооя: корреляция между удельным сопротивлением и его температурным коэффициентом в высокоомных сплавах [3]

териалы с удельным сопротивлением, меньшим 100–150 мкОм·см, имеют преимущественно положительный температурный коэффициент сопротивления, а с большим — отрицательный. Другими словами, если статический беспорядок создает «слишком» большое удельное сопротивление, то температура его немного уменьшает.

Заметьте. Речь идет лишь о материалах, состоящих только из металлических атомов, валентные электроны которых слабо связаны с ионными остовами и поэтому делокализованы, т. е. лишь о стандартных металлах в смысле (1.4). Сюда заведомо не относятся окислы металлов, полуметаллы типа Bi , соединения типа MoGe , высокотемпературные сверхпроводники и т. п.

С другой стороны. Как видно из таблицы 1.1, почти все моноэлементные жидкие металлы, являвшиеся объектами приложения дифракционной теории, имеют значения $\rho \lesssim 50$ мкОм·см, так что эти материалы тоже не подпадают под действие правила Мооя.

На графике рис. 1.3 не случайно отсутствуют данные о сплавах с $\rho > 300$ мкОм·см. Таких сплавов практически нет. Сотни исследованных композиций металлических сплавов, десятки различных методов изготовления разупорядоченных систем — все приводят к материалам с удельным сопротивлением, меньшим 300 мкОм·см. Хотя

эта величина в 3–4 раза меньше, чем максимальное сопротивление ρ^* , полученное из оценки на основании формул (1.5), по всей видимости именно его следует считать максимально возможным сопротивлением стандартного металла, которое получается в пределе $l \approx a$.

Наличие верхнего предела удельного сопротивления стандартного металла, как и правило Мооёйа, по-видимому обусловлены глубокими физическими причинами, связанными с экранированием в системе с большой плотностью свободных носителей. Вероятно, уменьшая амплитуду случайного потенциала, экранирование самосогласанным образом приводит его к критическому значению, при котором носители еще остаются свободными.

1.3. Насыщение сопротивления

Итак выясняется, что простым наращиванием статического беспорядка не удастся создать условия для перехода Андерсона в стандартном металле и что добавление теплового беспорядка к сильному статическому может даже уменьшить сопротивление. Можно, однако, испробовать еще одну возможность — взять металл со слабым статическим беспорядком, но с большой константой электрон-фононного взаимодействия, обеспечивающей быстрый рост сопротивления с температурой, и исследовать, чего можно достичь за счет чисто теплового беспорядка. Эта попытка базируется на естественной идее об эквивалентности статического (структурного) и динамического (теплового) беспорядка с точки зрения рассеяния электронов. Скорость теплового движения ионов порядка скорости звука, т. е. порядка 10^5 см/с, в то время как фермиевская скорость электронов $v_F \approx 10^8$ см/с. Поэтому движущиеся электроны всегда видят статичную картину, включающую в себя тепловые смещения ионов.

Температурная зависимость сопротивления за счет рассеяния электронов на фонах описывается формулой Грюнауизена

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \rho_0 + \beta T^5, & T \ll T_D, \\ \rho(T) &= \alpha T, & T \gg T_D, \end{aligned} \quad (1.14)$$

которая при температурах выше температуры Дебая T_D выходит на линейный закон. Для достижения больших $\rho(T)$ нужны как можно большее α и высокая температура. Коэффициент α тем больше, чем сильнее электрон-фононное взаимодействие, а температура ограничивается термодинамическими процессами, например, плавлением. Этими факторами определяется выбор материалов для экспериментов.

На рис. 1.4 приведены кривые $\rho(T)$ для монокристаллов двух интерметаллических соединений. Одно из них, Nb_3Sn , имеет температуру сверхпроводящего перехода $T_c = 18$ К и широко используется для изготовления сверхпроводящих соленоидов; второе, Nb_3Sb , тоже сверхпроводник, но у него $T_c = 0,2$ К. Сверхпроводимость здесь упоминается не случайно. Согласно классической теории сверхпроводимости, для столь высокого T_c , как 18 К необходимо сильное электрон-

фононное взаимодействие и, следовательно, можно ожидать больших значений коэффициентов β и α в формулах (1.14).

Обратимся к кривой для Nb_3Sb . Если ограничиться температурным интервалом $T < 200$ К, то мы имеем типичную кривую Грюнайзена: остаточное сопротивление при низких температурах, затем участок $T^{3,6}$ и выход на линейный рост (1.14), столь крутой, что можно было бы вполне рассчитывать на достижение критических значений при допустимых температурах $T \approx 900$ К. Однако вместо этого кривая $\rho(T)$ демонстрирует отчетливую тенденцию к насыщению на уровне

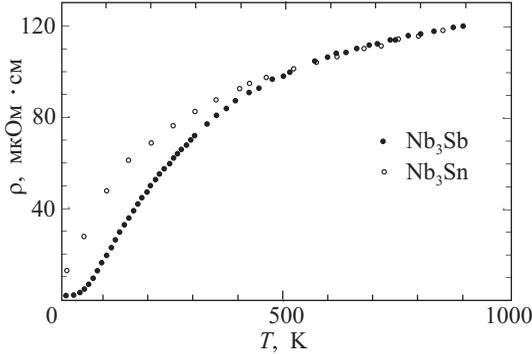


Рис. 1.4. Кривые $\rho(T)$ для монокристаллов двух интерметаллидных соединений, демонстрирующие насыщение сопротивления [4]

около 150 мкОм·см. Характерно, что уровень насыщения оказался одинаковым для обоих соединений, хотя при низких температурах фононное сопротивление у Nb_3Sn гораздо выше, чем у Nb_3Sb , что коррелирует с разницей T_c .

Феноменологически экспериментальные кривые рис. 1.4 хорошо описываются моделью шунтирующего сопротивления

$$\rho^{-1} = \rho_{\text{id}}^{-1} + \rho_{\text{sh}}^{-1}; \quad (1.15)$$

когда сопротивление ρ_{id} , соответствующее формуле Грюнайзена (1.14), становится слишком большим, ток начинает течь через шунтирующее сопротивление. Эта формула успешно использовалась для описания экспериментов. Однако с ее обоснованием имеются проблемы.

Обычно формула (1.15) свидетельствует о наличии параллельных каналов проводимости, например о наличии двух независимых групп носителей с разными параметрами и законами рассеяния, находящихся в одном и том же электрическом поле. Здесь никаких оснований для существования таких групп нет. Можно придти к формуле (1.15), сохранив одну группу носителей, но введя некоторые корреляторы актов рассеяния. Например предположим, что два акта рассеяния не могут произойти в одной элементарной ячейке, т.е. что между

актами рассеяния должно пройти минимальное время $\tau_0 = a/v_F$, за которое электрон успевает переместиться в соседнюю ячейку, после чего все ограничения снимаются и все происходит, как обычно [5]. Если момент первого акта рассеяния $t = 0$, то вероятность следующего акта предполагается равной

$$p = \begin{cases} 0, & t < \tau_0, \\ 1/\tau, & t > \tau_0. \end{cases}$$

Тогда в обычную формулу для проводимости (1.5), записанную через τ и эффективную массу m , $\sigma = ne^2\tau/m$, вместо τ в качестве среднего времени между столкновениями войдет $\tau + \tau_0$. Отсюда получается выражение (1.15) с

$$\rho_{\text{sh}} \approx \frac{\hbar}{e^2} a. \quad (1.16)$$

Хотя это как раз то, что получается в эксперименте, вряд ли приведенное рассуждение можно считать обоснованием применимости формулы (1.15). Лежащее в основе этого рассуждения предположение, что акты рассеяния являются точечными в пространстве и во времени, не очень убедительно. Например, дифракционная теория базируется на прямо противоположном предположении.

Вместе с тем сам экспериментальный факт, что насыщение происходит при значениях сопротивления (1.16), которые типичны для высокорезистивных сплавов (см. рис. 1.3) и соответствуют предельно малой длине пробега $l \approx a$, т. е. что $\rho_{\text{sh}} \approx \rho^*$, несомненен и очень важен. Он подтверждает, что статический и динамический беспорядок воздействуют на электроны примерно одинаково. Эквивалентность двух видов беспорядка дополнительно иллюстрируется серией кривых температурной зависимости сопротивления сплава TiAl с разной концентрацией Al (рис. 1.5). Чистый титан имеет малое остаточное сопротивление и сильный температурный рост с последующей тенденцией к насыщению. Качественно кривая $\rho(T)$ чистого титана ведет себя так же, как и на рис. 1.4. По мере увеличения концентрации Al остаточное сопротивление растет вместе со статическим беспорядком, а температурный рост уменьшается (при

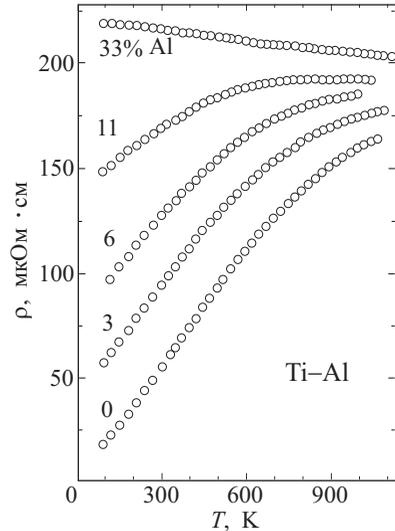


Рис. 1.5. Температурные зависимости сопротивления сплава TiAl с разной концентрацией Al [3]

33% алюминия температурный коэффициент даже отрицательный), но предельное высокотемпературное значение сопротивления меняется сравнительно мало, оставаясь в интервале значений, типичных для высокорезистивных сплавов.

В свете существования насыщения сопротивления интересна эволюция анизотропии сопротивления в монокристаллических материалах. Ее демонстрируют кривые температурной зависимости электросопротивления монокристаллического иттрия на рис. 1.6. В интервале 200–300 К сопротивление и температурный коэффициент α

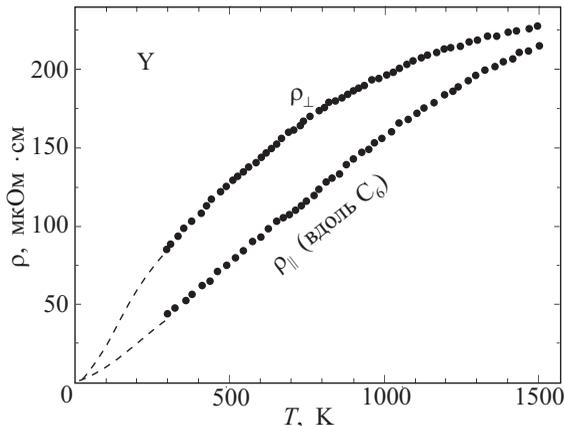


Рис. 1.6. Анизотропия температурной зависимости электросопротивления монокристаллического иттрия [6]

перпендикулярно гексагональной оси примерно в 2 раза больше, чем вдоль оси. Поэтому сопротивление перпендикулярно оси приближается к критическим значениям при более низких температурах и раньше проявляет тенденцию к насыщению. В результате при 1400 К разница в сопротивлениях вдоль этих двух направлений становится уже меньше 10%. Сопротивление насыщения ρ_{sh} в обоих направлениях, по-видимому, практически одинаковое.

Насыщение сопротивления наблюдается и в «нестандартном» металле, с несколько меньшей, чем в (1.4), концентрацией свободных зонных электронов. Обладающий металлической проводимостью оксид WO_2 имеет, согласно данным по эффекту де Гааза — ван Альфена, концентрацию носителей порядка $n \approx 2 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$. Он имеет моноклинную кристаллическую решетку и почти четырехкратную анизотропию сопротивления при комнатной температуре. На рис. 1.7 приведены кривые $\rho(T)$ для двух экстремальных направлений. В направлении, где сопротивление велико, оно демонстрирует тенденцию к насыщению с $\rho_{sh} \lesssim 2000 \text{ мкОм} \cdot \text{см}$. В другом направлении, где во всем температурном интервале $\rho \ll \rho_{sh}$, сопротивление следует формуле Грюнайзена без признаков насыщения.

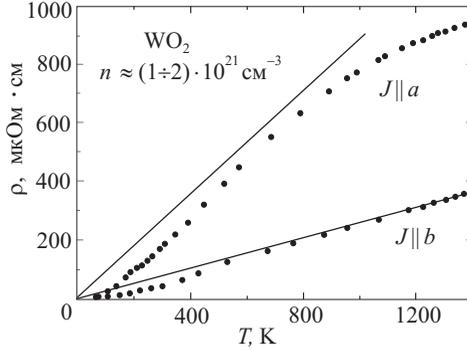


Рис. 1.7. Зависимости $\rho(T)$ для монокристалла WO_2 вдоль кристаллографических направлений с максимальным и минимальным сопротивлением [7]. Сплошные линии — это прямые предельной области закона Грюнайзена (1.14). Для сопротивления при направлении тока $\mathbf{J} \parallel \mathbf{a}$ коэффициент α получен в предположении, что справедлива формула (1.15) и что $\rho_{sh} = 2000 \text{ мкОм}\cdot\text{см}$.

1.4. Предел Иоффе–Регеля при большой электронной плотности

Очень поучительно свести все факты и явления, обсуждавшиеся в этой главе, на одну диаграмму. Отложим температуру T по одной оси, а частоту столкновений в энергетических единицах \hbar/τ_{eff} — по другой. В качестве характерного масштаба по обеим осям выберем фермиевскую энергию ε_F . Поскольку для стандартного металла $\varepsilon_F \sim \sim 10\,000 \text{ К}$, отрезок $(0 \div \varepsilon_F)$ на температурной оси включает все интересные нас температуры. Под частотой $1/\tau_{\text{eff}}$ подразумевается сумма частот рассеяния на статических дефектах $1/\tau$ и на фононах $1/\tau_{\text{ph}}$ (с учетом малоуглового характера фононного рассеяния при низких температурах):

$$1/\tau_{\text{eff}} = 1/\tau + 1/\tau_{\text{ph}}, \tag{1.17}$$

которая определяет статическое электросопротивление ρ . Верхний конец интервала на оси частот $\hbar/\tau_{\text{eff}} = \varepsilon_F$ соответствует пределу Иоффе–Регеля $l \approx k_F^{-1}$. Более высокие частоты столкновений попросту означали бы неправомочность модели с плоскими волнами в качестве волновых функций. Поэтому внутри квадрата $0 \leq T, \hbar/\tau_{\text{eff}} \lesssim \varepsilon_F$, изображенного на рис. 1.8, реализуются все транспортные явления в газе делокализованных электронов.

В этой главе обсуждался транспорт вблизи верхнего ребра этого квадрата — в области с сильным рассеянием. Сначала мы попытались приблизиться к верхней части квадрата, двигаясь вдоль его левой стороны, при сравнительно низких температурах. Здесь на уровне $(0,1 \div 0,2)\varepsilon_F$ применима дифракционная теория жидких металлов, в существенной части принадлежащая Займану. Ее важным

элементом является предположение, что волновые функции электронов — это плоские волны. Выше, вблизи левого верхнего угла квадрата, безразмерная величина $\hbar/(\varepsilon_F \tau_{\text{eff}})$ уже не является малым параметром и у теории появляются принципиальные трудности. Эксперимент устанавливает в этой области два базовых факта.

1. При сколь угодно сильном структурном беспорядке низкотемпературное сопротивление стандартного металла не превышает значения (1.6):

$$\rho \lesssim \rho^* \approx 300 \text{ мкОм} \cdot \text{см.}$$

2. Температурные зависимости сопротивления в левом верхнем углу квадрата подчиняются правилу Мооя, т. е. если сопротивление близко к значению (1.6), то рост температуры его не только не увеличивает, но даже несколько уменьшает.

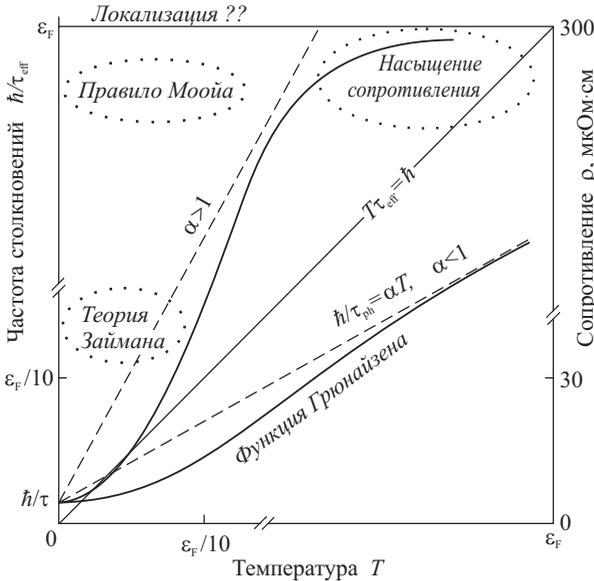


Рис. 1.8. Плоскость температура–беспорядок ($T, \hbar/\tau_{\text{eff}}$), на которой пунктирными эллипсами показаны области применимости теории Займана и правила Мооя и область, где наблюдается насыщение сопротивления. В осях ($T, \hbar/\tau_{\text{eff}}$) построены также графики сопротивления для двух случаев: (1.14) и (1.15). Штриховые прямые для обоих графиков — это высокотемпературные асимптотики функции Грюнрайзена.

Переходя к попыткам пересечь верхнюю сторону квадрата за счет температурного роста сопротивления веществ с сильным электрон-фононным взаимодействием, построим диагональ квадрата

$$\hbar/\tau_{\text{eff}} = T. \quad (1.18)$$

Запомните это уравнение диагонали. Записанное в виде $\tau_{\text{eff}} = \hbar/T$, оно очень напоминает выражение для времени расфазировки двух тепловых электронов, которое определяет квантовую поправку к проводимости из-за межэлектронной интерференции. Поэтому в гл. 2 о квантовых поправках снова фигурируют и тот же квадрат, и его диагональ (см. уравнения (2.29) и (2.39) и рис. 2.16).

Поскольку $\rho \propto 1/\tau_{\text{eff}}$, в осях $(T, \hbar/\tau_{\text{eff}})$ можно построить функцию Грюнайзена (1.14) (для ориентировки справа приведена также шкала в единицах удельного сопротивления). Коэффициент в высокотемпературной асимптотике функции Грюнайзена в осях $(T, \hbar/\tau_{\text{eff}})$ становится безразмерным. Для простоты сохраним для него обозначение α . Если во всех формулах, необходимых для вычисления α , пренебрегать численными коэффициентами, то все буквенные множители сократятся и получится $\alpha = 1$. Асимптотическая прямая αT , в зависимости от численных значений параметров конкретного металла, может оказаться с любой стороны от диагонали. Если $\alpha < 1$, то асимптотическая часть кривой располагается в нижнем треугольнике $T\tau_{\text{eff}} > \hbar$. Нас больше интересовал вариант $\alpha > 1$, при котором кривая должна достигать верхней стороны квадрата. Однако, как показали эксперименты, описанные в предыдущем параграфе, в этом случае при высоких температурах появляется насыщение сопротивления, не предусмотренное формулой Грюнайзена.

Таким образом ни увеличение статического, ни увеличение динамического беспорядка, ни их комбинация не привели к пересечению верхней стороны квадрата на рис. 1.8, за которой ожидается локализация Андерсона. Это означает, что в стандартном металле рост беспорядка сам по себе к локализации не приводит. Это экспериментальный факт, и с ним приходится считаться. Мы вернемся к обсуждению этого вопроса в гл. 5 при изложении концепции переходов металл–изолятор, а в гл. 7 покажем, как при помощи обходного маневра можно преодолеть заветную черту.

Список литературы

1. *Фабер Т.* Электронные явления переноса в жидких металлах; в *Физика металлов*. 1. Электроны / Под ред. Дж. Займана. — М.: Мир, 1972 (перевод книги *The physics of metals 1. Electrons* / Ed. J.M. Ziman. — Cambridge Univ. Press, 1969).
2. *Займан Дж.* Модели беспорядка. — М.: Мир, 1982 (перевод книги *Ziman J.M. Models of disorder*. Cambridge Univ. Press, 1979).
3. *Moos J.H.* // *Phys. Stat. Sol. (a)* **17**, 521 (1973).
4. *Fisk Z., Webb G.W.* // *Phys. Rev. Lett.* **36**, 1084 (1976).
5. *Gurvitch M.* // *Phys. Rev. B* **24**, 7404 (1981).
6. *Зиновьев В.Е., Соколов А.Л., Гельд П.В., Чуприков Г.Е., Епифанова К.И.* // *ФТТ* **17**, 3617 (1975).
7. *Гантмахер В.Ф., Кулеско Г.И., Теплинский В.М.* // *ЖЭТФ* **90**, 1421 (1986).