

# КОНДЕНСАЦИЯ ЛАНҒАН КҮЙДІҢ ФИЗИКАСЫ ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.9, 539.21:537.1

## Применение модели Андерсона для описания фазового перехода металл-изолятор

## Application of the Anderson model for describing the phase metal-insulator transition

Жарекешев И.Х.

*Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы (E-mail: isa2020@mail.ru)*

Тәртіпсіз реттелген металл-изолятордың фазалық ауысуы зерттелген. Жартылай өткізгіштер құрылымындағы ауысудың тәжірибелік бақылау мысалдары келтірілген. Жалпы Шредингер теңдігіне негізделген решетка үшін екінші кванттау формализмі қалыптасқан. Тәртіпсіз реттелген қатты денелердің электрондық қасиеттері үшін Андерсон моделін қолдану ұсынылған. Дискретті модельдердің қорытындыларын тәжірибемен салыстыру мүмкіндігі талқыланған.

The phase metal-insulator transition induced by disorder is investigated. The examples of experimental observation of the transition in semiconductor microstructures are presented. On the basis of the general Schrodinger equation the second-quantization formalism is developed for lattices. The application of the Anderson model for describing the electronic properties of conductivity in disordered solids is justified. The possibility of comparison between the results of the discrete model and experiment is discussed.

### 1. Введение

Согласно теореме Блоха электронные волновые состояния в идеальной кристаллической решетке распространены по всему объему. Это означает, что вероятность найти электрон является одинаковой по всему кристаллу. Такие распространенные состояния приводят к проводящему, или, другими словами, металлическому, поведению. Однако если в решетке присутствует беспорядок в форме хаотично расположенных в пространстве несовершенств, таких как примесные атомы или дислокации, то пространственная структура волновых функций модифицируется таким образом, что электронные состояния локализуются, т.е. становятся ограниченными в протяженности. Они не распространены по всему объему образца, а сосредоточены только в конечных его областях. Более точно, вероятность нахождения локализованного состояния не постоянна по координате: в одних областях она значительна, а в других — экспоненциально мала. Ясно, что тогда электронный транспорт (электрический ток) через такие локализованные состояния сильно затруднен. При дальнейшем увеличении беспорядка локализация состояний усиливается и, в конечном итоге, образец становится полностью непроводящим — превращается в изолятор. При этом говорят, что неупорядоченная система испытывает фазовый переход металл-изолятор. Таким образом, переход металл-изолятор — это переход между двумя различными фазовыми состояниями твердого тела, а именно между металлическим (проводящим) и изолирующим (непроводящим) состояниями. Следует заметить, что существует множество фазовых переходов между металлами и изоляторами, вызванных другими физическими механизмами, например, межэлектронным взаимодействием (переход Мотта) или обменными корреляциями (переход Хаббарда).

В отличие от указанного выше перехода переход, который обусловлен именно перестройкой структуры волновых функций электронных состояний за счет изменения степени беспорядка примесного потенциала, принято называть переходом Андерсона (по имени автора, объяснившего этот эффект), а само явление локализации электронных состояний — беспорядком, андерсоновской локализацией. Важно отметить, что превращение распространенного, т.е. делокализованного, состояния в локализованное в термодинамическом пределе не протекает непрерывно. По аналогии с критическими явлениями в статистической физике переход проводник-изолятор происходит практически скачкообразно, причем охватывая всю систему, при некотором определенном количестве беспорядка, характеризующем степень разбросанности примесных центров, их коррелированность в относительном положении и хаотичность или же амплитуду флуктуаций потенциалов примесных центров. Это фиксированное промежуточное количество беспорядка, при котором систему нельзя отнести ни к металлу, ни к изолятору, называют критической степенью беспорядка. Промежуточное между металлическим и изолирующим состояние системы точно при значении критического беспорядка принято называть критической точкой перехода металл-изолятор. Логично, что если степень беспорядка меньше критической, то система находится на «металлической» стороне перехода. И наоборот, если степень беспорядка превосходит критическую, то система принадлежит «диэлектрической» стороне перехода. Таким образом, две стороны перехода четко разделены одной границей, определяемой строго одним значением параметра, количественно характеризующего беспорядок примесного потенциала.

В настоящей работе рассматривается переход Андерсона в отсутствие как магнитного поля, так и сильного спин-орбитального взаимодействия.

## 2. Переход проводник-изолятор в эксперименте

В экспериментальных измерениях переход металл-изолятор наблюдается как резкое возрастание сопротивления образца при изменении каких-либо внешних или внутренних параметров. Например, при наложении магнитного поля удельное сопротивление сильно легированного полупроводника увеличивается на несколько порядков величины [1]. Аналогичное изменение происходит при сильном давлении, при изменении концентрации легирующей примеси [2] или при изменении толщины полупроводниковой пленки.

Отличие металлического поведения от изолирующего проявляется в различной температурной зависимости сопротивления. Как известно, если температура растет, то сопротивление металла увеличивается, в то время как сопротивление изолятора падает. По температурному закону проводимости можно заключить, находится ли данный экспериментальный образец в металлическом или изолирующем состоянии, в зависимости от какого-либо параметра, например, магнитного поля. Следовательно, изменение знака температурного эффекта на сопротивление ясно сигнализирует об изменении фазового состояния исследуемого образца, т.е. о наступлении в нем перехода металл-изолятор.

На рисунке 1 приведены графики температурной зависимости сопротивления  $\rho$ , измеренного в инверсионном двумерном слое полупроводникового МОП-транзистора для различной концентрации носителей [3]. Из рисунка видно, что при промежуточной концентрации  $n_c = 8,70 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ , которая является критической, сопротивление почти не зависит от температуры, указывая на переход металл-изолятор. Температурная независимость сопротивления, т.е. условие  $d\rho/dT=0$ , демонстрирует критическое поведение на переходе проводник-изолятор. Знак производной  $d\rho/dT$  на металлической стороне не меняется на противоположный при переходе на изолирующую сторону. Такое поведение объясняется на языке флуктуаций плотностью состояний электронного спектра. При этом функция распределения межуровневых расстояний испытывает аналогичный переход, соответствующий переходу Андерсона. Вместо температуры теперь фигурирует линейный масштаб  $l = \min\{L_\phi(T), L\}$ , который определяется длиной фазовой когерентности:

$$L_\phi(T) = f(T^\alpha)$$

или размером исследуемой системы.

В полупроводниках при конечной концентрации примесей одного сорта вместо единичных примесных уровней возникает примесная зона, имеющая конечную энергетическую ширину. Термин «примесная зона» обозначает лишь совокупность дискретных энергетических уровней, возникающих благодаря примесным центрам. Важнейшей характеристикой примесной зоны является плотность состояний  $g(E)$ . Она определяется как число уровней, попадающих в малый интервал энергий, отнесенное к этому интервалу и к объему системы. Следует иметь в виду, что в макроскопической систе-

ме плотность состояний является непрерывной функцией энергии в некотором интервале, даже если речь идет о примесной зоне, которая представляет собой набор дискретных уровней. Таким образом, плотность состояний не содержит информации, позволяющей отличить истинную зону от набора дискретных уровней, не связанных между собой и случайно разбросанных по энергетической шкале. Расположение примесей случайно также и в пространстве. Пример образования примесной зоны в неупорядоченной структуре изображен схематически на рисунке 1 справа.

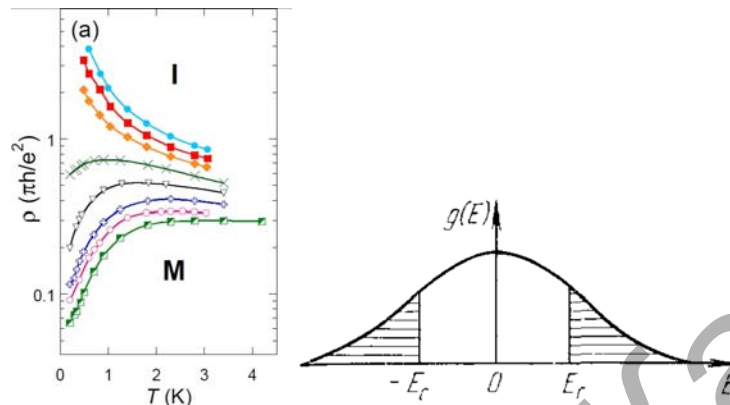


Рис. 1. Слева — удельное сопротивление как функция температуры, измеренное при разных плотностях электронов в кремниевой МОП-структуре. Наборы точек сверху вниз,  $\text{см}^{-2}$ :  $n_c = 7.24 \cdot 10^{10}$ ;  $7.53 \cdot 10^{10}$ ;  $7.83 \cdot 10^{10}$ ;  $8.26 \cdot 10^{10}$ ;  $8.70 \cdot 10^{10}$ ;  $9.14 \cdot 10^{10}$ ;  $9.58 \cdot 10^{10}$  и  $9.87 \cdot 10^{10}$  из [3]. Буквами М и I обозначены металлическая и диэлектрическая фазы соответственно. Справа — плотность состояний в модели Андерсона. Локализованные состояния заштрихованы, и энергии  $E_c$  и  $-E_c$ , отделяющие области локализованных и делокализованных состояний, являются порогами подвижности.

В ситуации с примесной зоной под переходом Андерсона подразумевается возникновение внутри нее полосы делокализованных состояний. Однако в этот термин вкладывают и другой смысл. В примесной зоне, показанной на рисунке 1, существует резкая граница между локализованными и делокализованными состояниями, изображенная сплошными горизонтальными линиями. Она соответствует порогу подвижности носителей заряда. Если каким-либо образом изменять заполнение примесной зоны квазичастицами, то будет меняться и положение уровня Ферми  $\epsilon_f$ . При этом изменении уровень Ферми может пересечь границу области локализации, называемую также краем подвижности, что приводит к существенным изменениям электронных свойств и проводимости системы. Это явление называют переходом Андерсона. Лежащий в его основе переход металл-изолятор, вызванный неупорядоченностью примесных центров, и является предметом исследования настоящей статьи.

### 3. Классификация неупорядоченных систем

Неупорядоченные системы в зависимости от вида и степени беспорядка в строении их каркаса можно разделить на два класса. К такому разделению можно естественно подойти, если учесть, что идеальный кристалл, состоящий, из общих соображений, из атомов нескольких сортов, характеризуется как геометрической правильностью положений всех точек каркаса, т.е. его трансляционной инвариантностью, так и регулярностью в расположении атомов разных сортов, т.е. композиционным порядком. В соответствии с этим к первому классу относятся такие неупорядоченные системы, в которых отсутствует лишь вторая из указанных двух упорядоченностей. Простейшим примером такой системы является неупорядоченный твердый раствор замещения. При этом если атомы растворимого вещества имеют существенно отличающиеся от атомов растворителя радиусы, то параметры решетки раствора могут отличаться от параметров решетки чистого растворителя. Последнее относится также к случаю, когда дефектами, приводящими к неупорядоченности системы, являются междузельные атомы, или вакансии. В этом случае нарушения решетки в ближайшей, захватывающей несколько первых координационных сфер, окрестности дефекта могут быть весьма значительными. Однако в целом такие точечные дефекты не могут нарушить топологию и геометрию решетки, поэтому в среднем ее периодическая структура сохраняется. В силу этого при построении теоретической модели можно считать, что во всех

подобных случаях имеется идеальная кристаллическая решетка, а неупорядоченность обусловлена тем, что узлы такой решетки занимают объекты, которые могут быть описаны лишь статистически (например, атомы одной из двух компонент, вероятность обнаружения которых в каждом узле равна  $p$  и  $1-p$ , где  $p$  — концентрация растворяемого вещества). В этом случае говорят о беспорядке замещения, или композиционном беспорядке.

Второй класс неупорядоченных систем составляют такие, в которых отсутствует трансляционная симметрия каркаса, т.е. дальний порядок в расположении образующих его частиц, хотя ближний порядок обычно имеет место. Такой тип беспорядка характерен для аморфных, жидких и газообразных сред, его обычно называют структурным, или топологическим. Поэтому в достаточной мере структурно неупорядоченная система должна содержать дефекты, нарушающие топологию криволинейной сетки и имеющие либо одномерный характер типа дислокационных петель, либо двумерный — типа поверхностей разрыва, разграничивающих участки такой сетки с различающейся ориентацией. В более общем случае примером структурно неупорядоченной системы может служить хаотичная плотная упаковка сфер, в настоящее время широко используемая в качестве структурной модели аморфных тел — металлических стекол, представляющих собой состояния вещества, полученные в результате неадиабатических процессов (быстрой закалки из расплава, напыления на охлаждаемую подложку и т.п.). В дальнейшем мы будем иметь дело с первым типом неупорядоченности, т.е. с композиционным беспорядком.

#### 4. Выбор и обоснование теоретической модели

В одночастичном приближении атомный остов заменяется статическим случайным полем, в котором движется квазичастица, в нашем случае электрон. Уравнением, описывающим его движение, является уравнение Шредингера

$$-\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi, \quad (1)$$

в котором потенциал  $V(r)$  является случайной функцией координаты. Общей формой для потенциала  $V(r)$  является следующая:

$$V(r) = \sum_j v_j(r - r_j). \quad (2)$$

Гамильтониан, определяемый уравнением (1) с потенциалом (2), часто бывает удобно записать в смешанном  $(k, r)$  представлении, в более явной форме демонстрирующем его разбиение на трансляционно-инвариантную и неупорядоченную части:

$$H = E_s(k) + \sum_n a_n v(r - n), \quad (3)$$

где  $E_s(k)$  — закон дисперсии оператора  $-\Delta + V_n(r)$ ;  $s$  — номер зоны. Для исследования основных характеристик структуры энергетического спектра удобно рассматривать по возможности более простые модели. С этой целью ограничимся случаем, когда трансляционно-инвариантная часть  $H^0$  полного гамильтониана (3) имеет лишь одну ветвь спектра, т.е. пренебрежем переходами между его различными разрешенными зонами, считая, например, что расстояние между ними достаточно велико. Гамильтониан в уравнении (3) заменяется на следующее выражение:

$$H = E(k) + V(\hat{n}), \quad \hat{n} = i \frac{\partial}{\partial k}. \quad (4)$$

Если оставить в (3) одну зону конечной ширины, т.е. заменить (3) на (4), то происходит фактически переход от непрерывного уравнения (1) с потенциалом (2) к дискретной системе вида

$$E(k) = \sum_n H_n^0 e^{ikn}, \quad \sum_m H_{n-m}^0 \psi_m + V_n \psi_n = E \psi_n, \quad (5)$$

где диагональные элементы  $V_n$  случайны. Дискретизация исходной непрерывной модели может быть достигнута иначе, путем использования известного в теории твердого тела приближения сильной связи [4, 5]. Случайный потенциал, отвечающий простейшей модели структурного беспорядка, получится из формулы (2), если считать, что точки  $r_j$  хаотически распределены по пространству со средней плотностью  $\bar{n}$ , а функции  $v_j(r)$  все одинаковы и не случайны:

$$V(r) = \sum_j v(r - r_j). \quad (6)$$

Ряд физических причин приводит к хаотичности формы потенциала  $v_j$ , моделирующего действие отдельного атома каркаса на квазичастицу. В общем случае радиусы действия потенциалов и харак-

терные расстояния между точками  $r_j$  имеют один и тот же масштаб длин, а число параметров, задающих, в силу неупорядоченности системы, их статистическое описание, чрезвычайно велико. Выделим из потенциала  $V(r)$  плавно изменяющуюся случайную составляющую, обусловленную перекрытием большого числа малых хвостов потенциалов  $v_j(r)$  на расстояниях, больших межатомных. Тем самым оставим в компоненте  $v_j$  только лишь его локальную часть. Упрощенной и логической параметризацией слагаемых в уравнении (2) является следующая:

$$v_j(r - r_j) = v_j F(r - r_j), \quad (7)$$

в которой различие в форме функций  $v_j$  сведено к различию в каждой точке их амплитуд. Амплитуды  $v_j$  можно характеризовать их типичным значением  $V$  и величиной их флуктуаций  $W$ , которые в силу макроскопической пространственной однородности не зависят от номера узла  $j$ . Поэтому можно считать, что

$$V \sim \langle v_j \rangle, \quad W^2 \sim \langle v_j^2 \rangle - \langle v_j \rangle^2,$$

где  $W$  играет роль степени беспорядка хаотического примесного потенциала. Угловые скобки означают усреднение по реализациям фигурирующих в задаче случайных параметров, в данном случае по реализациям случайного примесного потенциала. В структурно неупорядоченной среде параметром, который может оказаться малым, является отношение радиуса  $r_0$  функции  $F(r)$  к среднему расстоянию  $\bar{n}^{-1/2}$  между центрами  $r_j$  или к радиусу связанного состояния в одной яме (7), если эта величина больше. В примесной системе (например, в сплаве замещения) малость подобного параметра, представляющего собой концентрацию примесных атомов, соответствует в некоторых случаях реализуемой ситуации. Кроме того, можно проследить, как по мере увеличения этого параметра ее упорядоченное поведение сменяется на неупорядоченное. При достаточно малых концентрациях атомы настолько удалены друг от друга, что вызываемый перекрытием волновых функций отдельных атомов сдвиг некоторого одноатомного уровня  $E$  при характерных изменениях  $r_j$ , а также его сдвиг за счет флуктуаций  $v_j$  малы по сравнению с расстоянием от  $E$  до других уровней. В этом случае оправданна применимость приближения сильной связи, что позволяет заменить произведения  $F(r - r_j)\psi(r)$  в уравнении (1) их проекциями на связанное состояние:

$$\psi_{j_j}^{(0)}(r) = \psi^{(0)}(r - r_j), \quad \int \psi_{j_j}^{(0)2}(r) dr = 1$$

отдельного центра, где величины  $\psi_j = \int \psi(r)\psi_j(r) dr$  играют роль амплитуд волновой функции на центре  $r_j$ . Тогда мы имеем

$$-\Delta\varphi + \sum_j u_j \varphi_j \varphi_j(r) = E\psi. \quad (8)$$

Систему уравнений (8) можно привести к обычной форме спектральной задачи, в которую энергетический параметр входит линейно. Например, выводится следующее уравнение:

$$\sum_{i \neq j} H_{r_j - r_i}^0 \psi_i + v_j \psi_j = \epsilon \psi_j. \quad (9)$$

Предполагается, что величины  $v_n$  являются статистически независимыми при различных  $n$ . При этом обычно используют некоторую однопараметрическую форму их плотности вероятностей  $P(v)$ , например:

$$P(v) = \begin{cases} 1/W, & |v| \leq W/2, \\ 0, & |v| > W/2. \end{cases} \quad (10)$$

Модель, в которой учитывались такая форма распределения «затравочных» потенциалов  $v_n$  и только взаимодействие ближайших соседей, была впервые рассмотрена Андерсоном [6] в связи с проблемой локализации носителей заряда в неупорядоченных твердых телах. Явление перехода проводник-изолятор, обусловленное разупорядочением, как раз и объясняется на основе этой модели Андерсона. Точное решение модели Андерсона в общем случае невозможно, за исключением редких предельных случаев, например, очень слабого беспорядка  $W$ . Поэтому в физической ситуации, где степень беспорядка существенна, в особенности вблизи перехода проводник-изолятор, вместо аналитических методов прибегают к точному численному моделированию. При численном моделировании часто применяется формула (10) для распределения локальных энергий узлов.

### 5. Заключение

Модель Андерсона (9) с потенциалом (10) применяется для вычисления статистических свойств электронного спектра мезоскопических образцов в различных физических случаях, а именно: в при-

сутствии симметрии к обращению времени, сильного спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля. Для многих из этих ситуаций в настоящий момент имеются экспериментальные измерения, проведенные в различных лабораториях. Результаты этих экспериментальных измерений можно сравнить с нашими теоретическими результатами в тех диапазонах параметров, которые учитываются решеточной моделью. Многие из этих результатов хорошо согласуются друг с другом, подтверждая тем самым, что теоретический подход адекватно объясняет рассматриваемое явление фазового перехода металл-изолятор. Наиболее яркой и убедительной проверкой предлагаемого в настоящей работе аналитического исследования является отличное согласие экспериментальных данных по статистике дискретных уровней в наноструктурных МОП-транзисторах с результатами вычислений, проведенных в условиях сильного спин-орбитального взаимодействия [7]. Представляется возможным привести прямое сравнение графиков для функций распределения уровней энергии из теоретической модели и из эксперимента, что и будет сделано в будущих работах.

### References

1. *Waffenschmidt S., Pfeleiderer C., Loehneysen H.V.* Critical behavior of the conductivity of Si:P at the metal-insulator transition under uniaxial stress // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83. — P. 3005–3008.
2. *Loehneysen H.V.* Metal-insulator transition in heavy doped semiconductors // *Current Opinion in Solid State and Materials Science.* — 1998. — Vol. 3. — № 1. — P. 5–15.
3. *Anissimova S., Kravchenko S.V. et al.* Flow diagram of the metal-insulator transition in two dimensions // *Nature Physics.* — 2007. — Vol. 3. — P. 707–710.
4. *Madelung O.* Physics of a solid state: the Localized conditions: the lane with English / Under the editorship of V.M.Agranovich. — M.: Science, 1985. — 184 p.
5. *Paierls R.* The quantum theory of solid states: The lane with English. IL — M., 1956. — 476 p.
6. *Anderson P.W.* Absence of Diffusion in Certain Random Lattices // *Phys. Rev.* — 1958. — Vol. 109. — P. 1492–1505.
7. *Schweitzer L., Zharekeshv I.Kh.* Critical level spacing distribution of two-dimensional disordered systems with spin-orbit coupling // *J.Phys.: Condens. Matter.* — 1995. — Vol. 7. — P. L377–L382.

УДК 535.37:535.34:539.19

## Природа пиков ТСЛ в кристаллах $K_2SO_4-Sm$

### The nature of TL peaks in $K_2SO_4-Sm$ crystals

Ким Л.М.<sup>1</sup>, Кокетайтеги Т.А.<sup>1</sup>, Салькеева А.К.<sup>2</sup>, Балтабеков А.С.<sup>1</sup>, Тагаева Б.С.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Карагандинский государственный университет им. Е.А.Букетова

<sup>2</sup>Карагандинский государственный технический университет (E-mail: abskargu@mail.ru)

$K_2SO_4-Sm$  кристалдарындағы рекомбинациялық люминесценцияға зерттеу жүргізілді. ТСЛ қисығында максимумдары 100 К, 135 К және 220 К жаңа жарқырау шыңдары пайда болады. Үлгілерді термиялық өңдеуден кейін максимумдары 100 К және 220 К жарқырау шыңдары жоғалып кетеді. Ол кристалдарда су молекулаларының бар болуына байланысты. 135 К және 220 К ТСЛ шыңдары радиациядан пайда болған қоспалық орталықтардың ыдырауына негізделген. Қоспалық иондар 135 К аймақта рекомбинация орталықтары болып табылмайды. Су молекулалары радиациядан пайда болған қоспалық орталықтардың термиялық деңгейінің артуына әкеледі.

An investigation of the recombination luminescence of  $K_2SO_4-Sm$  is done. Three new peaks of the luminescence at 100K, 135K and 220K appear on the TL curve. As a result of thermal treatment of samples the luminescence peaks at 100K and 220K disappear. Hence, they are connected with presence of water molecules in crystals. The TL peaks at 135K and 220K are caused by the disintegration of the impurity radiation-induced centers. The impurity ions in the area 135K aren't the centers of recombination. The water molecules lead to increase of level thermal stability for impurity radiation-induced centers.

Ионы редкоземельных элементов (РЗЭ) являются стандартными люминесцентными зондами при изучении различных процессов при фото- и радиационном возбуждении кристаллов (см., например, [1]). Сульфаты щелочных металлов образуют обширный класс соединений. По своему строению и