

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОРДЕНА ЛЕНИНА

ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

имени П. Н. ЛЕБЕДЕВА

Отдел теоретической физики им. И.Е. Тамма

Препринт № 153

М.В. Садовский

ЭЛЕКТРОНЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ И ТЕОРИЯ
"ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ"

T - 16407

Подписано в печать 24 октября 1973 года

Заказ № 607, Тираж 100 экз.

Отпечатано на ротационной машине в ФИАН СССР

Москва, В-312, Ленинский проспект, 53

Москва-1973

М. В. Садовский

ЭЛЕКТРОНЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ И ТЕОРИЯ
ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Аннотация

Работа представляет собой обзор ряда теоретических моделей, используемых в настоящее время для описания электронных свойств неупорядоченных систем. Особое внимание уделяется теории жидких полупроводников. Кратко обсуждаются результаты экспериментальных исследований. Далее рассматриваются проблемы описания электронного спектра и локализации электронов в неупорядоченных системах, вопросы электронной кинетики и роль межэлектронных корреляций.

В в е д е н и е

Исследования электронных свойств неупорядоченных систем привлекает в настоящее время внимание большого числа экспериментаторов и теоретиков. Достигнутый в этой области прогресс выражается, во-первых, в большом количестве экспериментального материала (в основном по кинетическим свойствам рассматриваемых систем), а во-вторых - в построении определенных теоретических моделей качественно объясняющих наблюдаемые явления. Вместе с тем последовательная теория в настоящее время практически отсутствует. Настоящий обзор посвящен обсуждению существующих моделей, причем уклон делается в сторону электронной теории жидких полупроводников. Изложение на в коей мере не является исчерпывающим: обсуждаются только наиболее употребляемые в литературе последних лет модели, причем ряд направлений либо не рассматривается вовсе, либо едва упоминается. Естественно, что выбор материала целиком определяется субъективными интересами автора. Рассмотрение экспериментальных данных сведено к минимуму и имеет чисто иллюстративный характер. Для более подробного знакомства с экспериментами, также как и с вопросами теории, следует обратиться к монографиям 1-3, а также к обзорам 4-6, где можно найти и исчерпывающую библиографию.

1. Эксперимент

Существует несколько классов неупорядоченных систем, обладающих электронным механизмом проводимости:

- а) жидкие металлы ($K, Na, Fe, \dots, Ge, Bi \dots$)
- б) "жидкие полупроводники" ($GeTe, Te, PbTe, CdTe \dots$)
- в) аморфные полупроводники (Si, Ge -IV группа; $P, As, Sb,$ -V группа; S, Se, Te -VI группа. - т.н. "халькогениды").

Жидкие металлы характеризуются падающей с температурой электропроводностью: $\frac{d\sigma}{dT} < 0$; $\sigma \sim 10^4 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ и температурнонезависимым эффектом Холла: $R < 0$; $\frac{dR}{dT} = 0$; $|R| \approx |R_0|$, где R_0 - константа Холла в модели свободных электронов. Для интерпретации этих свойств хорошо применимо приближение почти свободных электронов. Конечное сопротивление возникает из-за рассеяния на нерегулярностях в расположении ионов (теория Займана) I-4,6.

Жидкие полупроводники. В последние годы проводились широкие экспериментальные исследования расплавов большинства известных полупроводников. При этом выяснилось (см. обзоры I,4,7), что по своим кинетическим свойствам в жидком состоянии полупроводники могут быть разделены приблизительно на три группы. К первой относятся такие вещества как $Ge, InSb$ и другие $A_{III}B_{V}$, которые при переходе в жидкое состояние дают расплавы с чисто металлическими свойствами. По-видимому, это связано с тем, что при плавлении в этих веществах происходит разрушение не только дальнего, но и ближнего порядка, соответствующего данному кристаллу (изменяется, например, координационное число). Вторую группу образуют вещества типа $PbTe, SnTe, PbSe, In_2Te_3, Ga_2Te_3$ и др., представляющие из себя в кристаллическом состоянии типичные полупроводники (с узкой запрещенной зоной). При плавлении их электропроводность по абсолютной величине и

температурному ходу сохраняет практически то же поведение, что и в соответствующем кристалле $\frac{d\sigma}{dT} > 0$; $10 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1} \leq \sigma \leq 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. Знак термоэдо, как правило, свидетельствует о проводимости p-типа. Однако по эффекту Холла они проявляют типично металлические свойства: константа Холла почти не зависит от температуры, - знак ее соответствует проводимости n-типа, а по абсолютной величине она несколько превышает значение для металла с двумя свободными электронами на атом $R < 0$; $|R| \geq |R_0|$. Эти вещества, именуемые обычно "жидкими полупроводниками", образуют, таким образом, группу, промежуточную между типичными металлами и полупроводниками. Их свойства, по всей видимости, могут быть рассмотрены в рамках приближения почти свободных электронов с учетом сильного рассеяния в области энергий, совпадающей с запрещенной зоной соответствующего кристалла, и обусловленного сохраняющимся "ближним" порядком того же типа. (Координационное число не меняется при плавлении, локально сохраняется структура того же типа, что и в кристалле. Третью группу образуют вещества типа GeS, SnS, V_2O_5 и др. с очень малой электронной подвижностью, которые следует, по-видимому, рассматривать в приближении "сильной связи" электронов с ионами. ($\frac{d\sigma}{dT} > 0$, вплоть до $\sigma \sim \sigma_0 \exp\{-\frac{A}{T}\}$; $R < 0$; $|R| > |R_0|$; $\sigma \leq 100 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$).

Аморфные полупроводники. I,5,8. Электропроводность полупроводникового типа: $\frac{d\sigma}{dT} > 0$; $\sigma \sim \sigma_0 \exp\{-\frac{A}{T}\}$ - один из возможных способов описания, однако $\sigma_0 \leq \sigma_{crystal}$; $\Delta \sim \Delta_{crystal} \sim \Delta_{optical} \sim 2ev$. В то же время типично $R < 0$, $|R| > |R_0|$; т.е.д.с. $\alpha > 0$ так что p-р аномалия имеет место. Интерес к аморфным (а теперь и к жидким

полупроводникам) в значительной мере обусловлен открытием эффекта "переключения" (*switching*) I (Овчинский 1958г)^X: предсказыва-
ется революция в микроэлектронике (вытеснение транзисторов, создание
миниатюрных и быстродействующих элементов памяти т.д. II . Со-
ответствующие устройства крайне дешевы, ввиду отсутствия необходи-
мости в использовании сверхчистых материалов, типичной для тран-
зисторной электроники. Вольт-амперные характеристики и схема пере-
ключающих устройств изображены на рис.1. Механизм "переключения"
связан, по-видимому, с явлениями типа пробоя или разогрева электро-
нов. "Переключения с памятью" возможно связаны еще и со структурны-
ми переходами типа "порядок-беспорядок" (см. 5)

С теоретической точки зрения нас будет интересовать, главным обра-
зом вопрос о том, как может быть в теории получен жидкий или
аморфный полупроводник, то есть как может быть получен какой-либо
аналог зонного спектра электронов в жидкой или аморфной системе?
Мы не будем подробно обсуждать поведение электронов в жидких ме-
таллах так как здесь не возникает столь трудной проблемы, а скон-
центрируем внимание на построении теоретической модели для аморфных
и жидких полупроводников. При построении такой теории обычно выде-
ляются:

- а) энергетически неупорядоченные системы (модели) (например, бинар-
ный сплав, модель Андерсона, электрон в случайном поле).
- б) Структурно неупорядоченные системы (модели) (то есть системы
(модели) с явно учитываемым отсутствием дальнего порядка в распо-
ложении рассеивающих центров). Вполне естественно, что теоретиче-
ское рассмотрение энергетически-неупорядоченных систем развито луч-

X) Недавно эффект переключения открыт в ряде жидких полупро-
водников. См. напр. 9,10 .

ше, тем более что современный прогресс в понимании ряда свойств
неупорядоченных систем начался с рассмотрения модели Андерсона
(1958г.) I2 .

Можно выделить две основные проблемы:

- а) Вопрос о "спектре" электронов в неупорядоченной системе.
- б) Описание электронной кинетики.

Промежуточным звеном является вопрос о локализации электронов.

2. Модель Мотта-Козна-Фришца-Овчинского и плотность состояний "жидкого полупроводника"

Полученные в модели Андерсона результаты относительно возмож-
ной локализации электронов в неупорядоченных системах, также как
работы многочисленных авторов касательно возникновения "хвостов"
плотности состояний в сильно легированных полупроводниках и других
подобных системах (см. например I2-I4) привели к формулировке
качественной модели электронного спектра аморфных и, по-видимому,
жидких полупроводников, получившей в литературе название модели
Мотта-Козна-Фришца-Овчинского I,15 . В этой модели принимается
картина плотности состояний в отдельной зоне неупорядоченной систе-
мы, изображенная на рис.2. Существенным моментом является то, что
Двухзонный случай см. на Рис.3
локализованные состояния в "хвостах" плотности состояний считают-
ся происходящими не от отдельных атомов, а от флуктуаций эффектив-
ного потенциала всей системы, возникающих из-за общей неупорядочен-
ности в их расположении. Происхождение хвостов можно понять с по-
мощью представления об "искривлении" краев энергетических зон кри-
сталла случайным полем, возникающим в аморфной системе I6 .
Картина плотности электронных состояний МКФО для ряда "жидких по-
лупроводников" подтверждается недавними ЯМР экспериментами. В этих
экспериментах измерялась I7 :

1) Сдвиг Найта, главный вклад в который определяется формулой

$$K = \frac{4}{3} \pi (\gamma_e \hbar)^2 \langle |\psi(0)|^2 \rangle_F N(\epsilon_F) \quad (2.1)$$

где γ_e - гиромагнитное отношение для эл-на, $\langle |\psi(0)|^2 \rangle_F$ - квадрат модуля S -электронной волновой функции, усредненный по поверхности Ферми, $N(\epsilon_F)$ - плотность состояний на поверхности Ферми.

Тогда отношение плотностей состояний на уровне Ферми для "жидкого полупроводника" к таковому в модели свободных электронов

$$g = \frac{N(\epsilon_F)}{N_0(\epsilon_F)} \approx \frac{K(\text{"жидкий полупроводник"})}{K(\text{металл})} \quad (2.2)$$

- то есть может быть определено путем измерений K для определенно-го ядра в "жидком полупроводнике" и последующего сравнения с K для того же ядра, но в металле с числом свободных электронов на атом, соответствующим рассматриваемому полупроводнику.

2) Спин-решеточная релаксация: время установления равновесия в системе ядерных спинов определяется главным образом их взаимодействием с электронами проводимости, причем:

$$R \equiv \frac{1}{T_1} \approx \frac{4}{\hbar^2} |\langle m | \mathcal{H}_{int} | m + \mu \rangle|^2 \tau_c \quad (2.3)$$

где τ_c - характерное время взаимодействия порядка времени, проводимого электроном у ядра. В металлической ситуации $\tau_c^{free} \sim \frac{a}{v_F} \sim \frac{\hbar}{N(\epsilon_F)^{-1}}$ и имеем

$$R \approx \frac{4\pi \gamma_n^2}{\gamma_e^2 \hbar} T K^2 \equiv R_{Korring} \quad (2.4)$$

- соотношение Корринга, где γ_n - ядерное гиромагнитное отношение.

В общем случае произвольного τ_c :

$$R = 16 \frac{\gamma_n^2 K^2 T \tau_c}{\gamma_e^2 \hbar^2 N(\epsilon_F)} \quad (2.5)$$

так, что можно определить параметр:

$$\eta = \frac{R}{R_{Korring}} \approx \frac{\tau_c}{\hbar N(\epsilon_F)} \sim \frac{\tau_c}{\tau_c^{free}} \quad (2.6)$$

являющийся мерой степени локализации электрона в окрестностях данного узла. Результаты η для Ir_2Te_3 приведены в таблице (температура плавления $950^\circ K$):

$T (K^\circ)$	g	η
950	0,12	100
1025	0,21	17
1100	0,31	6
1250	0,41	2,9
1400	0,46	2,0

Эти результаты указывают на существование в жидком Ir_2Te_3 ярко выраженной псевдощели и на некоторую тенденцию к локализации электронов на уровне Ферми.

Для Ga_2Te_3 результаты вполне аналогичны. В Sb_2Te_3 g и η соответствует картине почти свободных электронов (с точностью 20%) при всех температурах (точность не очень высока!). Проиллюстрируем возникновение хвоста плотности состояний на примере электрона в газе твердых шаров. Естественно возникают параметры малости:

$$\rho a^3 \ll 1; \quad \frac{a}{\lambda_T} \ll 1 \quad (2.7)$$

где ρ - плотность рассеиваний, a - длина рассеяния. В этих условиях рассеивание на газе твердых шаров может быть рассмотрено в рамках "оптической" модели, в которой газ действует как эффективный потенциальный барьер, определяемый из:

$$V_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) 4\pi \rho a \quad (2.8)$$

Система представляется разбитой на ячейки C_i объема $\omega = L^3$ и число рассеивателей N_i в ячейке рассматривается как случайная переменная. Далее предположим, что плотность состояний есть сумма вкладов отдельных ячеек:

$$N(E) = \sum_i N_i(E) \quad (2.9)$$

где $N_i(E)$ есть плотность состояний в ящике с постоянным потенциалом

$$V_i = \frac{4\pi\hbar^2 N_i a}{2m\omega} \quad (2.10)$$

$$N_i(E) = 2\omega \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3} (E - V_i)^{1/2}$$

Типичный размер волнового пакета в такой ячейке $L \sim \frac{\hbar}{p_x} \sim \hbar \left(\frac{3}{2mE}\right)^{1/2}$. Учитывая $E \sim V_0$, имеем

$$L \sim \hbar \left(\frac{3}{2mV_0}\right)^{1/2} = \left(\frac{3}{4\pi\rho a}\right)^{1/2} \quad (2.11)$$

и среднее число рассеивателей в ячейке:

$$\langle N \rangle = \rho L^3 \sim \left\{ \left(\frac{3}{4\pi a}\right)^3 \frac{1}{\rho} \right\}^{1/2} \quad (2.12)$$

и $\rho a^3 \gg 1$ ведет к $\langle N \rangle \gg 1$, так, что N_i распределены в ячейках по Гауссу со средним значением $\langle N \rangle$ и средним отклонением $\langle N \rangle^{1/2}$.

Тогда полная плотность состояний представляется в виде:

$$N(E) = 2\Omega \frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3} \frac{V_0^{1/2}}{\langle N \rangle^{1/2}} \mathcal{F}\left(\frac{E - V_0}{V_0} \langle N \rangle^{1/2}\right) \quad (2.13)$$

$$\mathcal{F}(\varepsilon) \equiv (2\pi)^{-1/2} \int_0^\infty dz z^{1/2} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\varepsilon - z)^2\right\} \quad (\text{см. Рис. 4}) \quad (2.14)$$

(2.13) есть результат усреднения (2.10) с Гауссовым распределением:

$$\mathcal{P}(V_i) = \sqrt{\frac{\Delta}{2\pi}} \exp\left\{-\frac{\Delta}{2}(V_i - V_0)^2\right\} \quad (2.15)$$

где $\Delta^{-1} = \langle (V_i - V_0)^2 \rangle$.

Из этого результата можно видеть, что

а) При $E \gg V_0$, то есть $E \gg V_0 + \frac{V_0}{\langle N \rangle^{1/2}}$, почти каждая ячейка дает вклад в $N(E)$. Электрон практически свободен.

в) Хвост в области отрицательных ε происходит от тех немногих ячеек, в которых плотность рассеивателей весьма мала. Если электрон попадает в такую ячейку, то окружающие ячейки действуют как непроходимый барьер, то есть электрон связывается. Асимптотически имеем:

$$\mathcal{F}(\varepsilon) = \frac{1}{2\sqrt{2}} |\varepsilon|^{3/2} e^{-\varepsilon^2/2} \quad (2.16)$$

т.н. "Гауссов хвост" (см. 13-15).

Граница зоны размазана по области $\Delta E \sim \frac{V_0}{\langle N \rangle^{1/2}}$, что значительно меньше сдвига V_0 в положении дна зоны. Ячейки, таким образом, разделились на два класса: класс разрешенных ячеек, где

$$V_i = V_0 \frac{N_i}{\langle N \rangle} < E \quad (2.17)$$

и класс запрещенных ячеек, в который входят все остальные. Состояние электрона локализовано в классическом смысле, если оно окружено замкнутой поверхностью лежащей всюду внутри запрещенных ячеек.

Если локализованное в классическом смысле состояние имеет в своей окрестности разрешенную ячейку, то электрон может в ней туннелировать. Поэтому часть электронов, локализованных в классическом смысле, становятся делокализованными резонансными состояниями, которые дают очень малый вклад в подвижность. Таким образом "граница подвижности" E_c фактически несколько меньше, нежели соответствующее классическое значение (см. ниже раздел 4).

Все сказанное до сих пор ни в малейшей степени не объясняет, откуда в неупорядоченной системе берется "двухзонная" картина плотности состояний типа изображенной на рис. 3. Попытки объяснить такую картину должны и в теории неупорядоченных систем исходить из двух предельных случаев, рассматриваемых в теории твердого тела:

1) приближение "сильной связи"

2) модель "почти свободных" электронов.

В первом случае исходит из картины электронов, волновые функции которых локализованы рядом отдельных атомов. По мере сближения свободных атомов их уровни, как известно [21] расплываются в энергетическую полосу, причем это расплывание объясняется перекрытием функций и не связано, вообще говоря, с каким-либо дальним порядком и никакой подсистеме (теоремой Блоха) (см. рис. 5). Поэтому кажется очевидным, что в такой ситуации возникает своего рода зонная структура, определяемая только ближним порядком и перекрытием волновых функций ближайших соседей. При этом (сильная связь!) вполне может сохраниться, казалось бы, даже запрещенная зона.

В последнее время появились схемы, реализующие эти идеи в математической форме [22-26]. Так, в работе [22] рассмотрен гамильтониан неупорядоченной системы, состоящей из атомов типа Ge (с 4-мя ковалентными связями), причем электроны рассматриваются как локализованные на атомах и связях. Гамильтониан системы записывается в виде:

$$H = \sum_{i,v} V_1 |\phi_{iv}\rangle \langle \phi_{iv}| + \sum_{i \neq i', v} V_2 |\phi_{iv}\rangle \langle \phi_{i'v}| \quad (2.7)$$

где i - номер узла, v - номер связи на узле, ϕ_{iv} - соответствующая волновая функция, V_1 описывает переходы между связями на одном узле, V_2 описывает переходы между узлами, но на соответствующие связи. Если $V_2 = 0$ (система свободных атомов), то каждый атом имеет ошглетное состояние с энергией $E = 3V_1$ и триплетное с энергией $E = -V_1$. При $V_2 = 0$ имеем картину невзаимодействующих ковалентных связей с энергиями электронов $E = \pm V_2$ (т.н. *bonding-antibonding bands*). Параметр $|V_1/V_2|$ определяет зонную структуру. На практике связи и образующаяся зона, соответствующие волновым функциям *bonding*

и *antibonding* типа, расщеплены по энергиям на величину V_2 , тогда как их ширина определяется V_1 . Удастся строго доказать, что запрещенная зона при этом сохраняется. Следует заметить, что существование запрещенной зоны чувствительно к предположению о постоянстве V_1 и V_2 от узла к узлу. Очевидно, что в реальной неупорядоченной системе V_1 и V_2 флуктуируют, что ведет к уменьшению запрещенной зоны или к полному ее закрытию с образованием псевдощели.

К этому же направлению следует, по-видимому, отнести работы группы Ваймана [23-26], в которых путем машинных расчетов показывается, что картина плотности состояний в аморфных структурах Ge и Si определяется рассеянием электронов на сравнительно небольших "кластерах" (≈ 10 атомов), причем она не очень чувствительна к предположениям о распределении самих "кластеров". При этом получается плотность состояний с типичной псевдощелью, которая, по-видимому, вполне соответствует имеющимся экспериментальным данным (см. рис. 6).

Все эти работы подтверждают старую идею Йоффе и Регеля о том, что "зонная" структура аморфных и жидких систем определяется главным образом ближним порядком [27].

Отметим, что работы [23, 24] в известном смысле дают универсальный метод машинного расчета "зонной структуры" неупорядоченных систем с известным ближним порядком. Однако, до настоящего времени отсутствует убедительная схема, приводящая к картине плотности состояний с псевдощелью и соответствующая описанию полупроводника на языке "почти свободных" электронов, рассеивающихся на слабом псевдопотенциале ионов, коррелированным образом распределенных в жидкости. Первые попытки в этом направлении были предприняты в известных работах Эдвардса [28]. Однако ему не удалось получить сколько-нибудь

определенных и законченных результатов, а последующие расчеты на ЭВМ с использованием реальных структурных факторов жидкости и модельных псевдопотенциалов привели (для металлов!) к картине плотности состояний, очень близкой к таковой для свободных электронов. Ниже мы покажем, что при определенных модельных предположениях все же удается, в рамках самосогласованного приближения Эдвардса, получить плотность электронных состояний с характерной псевдощелью, возникающей из-за эффективно сильного рассеяния в области энергий, соответствующей бывшей запрещенной зоне кристалла $3I$.

В общей части наше рассмотрение эквивалентно самосогласованному варианту приближения Эдвардса, так что одноэлектронная функция Грина, усредненная по ансамблю ионных конфигураций, определяется уравнениями:

$$G(\epsilon p) = \{\epsilon - \xi_p - \sum (\epsilon p)\}^{-1} \quad (2.8)$$

$$\sum (\epsilon p) = \frac{1}{N} \sum_q |K_{p+q}| |V|p\rangle|^2 S(q) G(\epsilon p+q) \quad (2.9)$$

где $S(q)$ - структурный фактор жидкости, определяемый экспериментально и имеющий характерный максимум при $|q| = |K|$. (см. рис.7).

$\langle V|p\rangle$ - матричный элемент ионного псевдопотенциала, вообще говоря нелокального, $\xi_p \equiv \frac{p^2}{2m} - \mu$, μ - химпотенциал (уровень Ферми), N - полное число ионов в системе.

Мы рассмотрим сначала типично "полупроводниковую" ситуацию, когда $2p_f = K$, то есть диаметр сферы Ферми свободных электронов совпадает с модулем волнового вектора, определяющего положение главного максимума структурного фактора. Для одномерной модели этот случай проиллюстрирован на рис.8, где изображены кривые спектра свободных электронов (приближение "пустой" решетки для соответствующего кристалла). В этой модели, рассматривая электрон с $p \sim +K/2$

и моделируя $S(q)$ двумя острыми пиками при $q = \pm K$, мы получаем главный вклад в (2.9) в виде:

$$\sum (\epsilon p) \equiv A^2 \{\epsilon - \xi_{p-K} - \sum (\epsilon p-K)\}^{-1} \quad (2.10)$$

где

$$A^2 \equiv \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |V_q|^2 S(q) \quad (2.11)$$

L - длина системы. Нетрудно убедиться, что поправки на конечную ширину пиков $S(q)$ малы, если x)

$$x = \frac{1}{R_c} \ll |p - p_f| \quad (2.12)$$

где x - упомянутая ширина, R_c - определенный в (2.12), играет роль радиуса корреляции "ближнего" порядка в одномерной модели жидкости. На рис.8 видны следующие свойства симметрии спектра свободных электронов:

$$\begin{aligned} \xi_{p-K} &= -\xi_p \quad \text{при } p \sim +K/2 \\ \xi_{p+K} &= -\xi_p \quad \text{при } p \sim -K/2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Тогда (2.10) сводится к:

$$\sum (\epsilon; \pm \xi_p) = A^2 G(\epsilon; \mp \xi_p) \quad (2.14)$$

так что функция Грина определяется системой уравнений:

$$\begin{aligned} \epsilon - \xi_p - G^{-1}(\epsilon; \xi_p) &= A^2 G(\epsilon; -\xi_p) \\ \epsilon + \xi_p - G^{-1}(\epsilon; -\xi_p) &= A^2 G(\epsilon; \xi_p) \end{aligned} \quad (2.15)$$

решение которой дает:

$$G^{R,A}(\epsilon; \xi_p) = -\frac{\epsilon + \xi_p}{2A^2} \left\{ \sqrt{1 - \frac{4A^2}{(\epsilon + i\delta)^2 - \xi_p^2}} - 1 \right\} \quad (2.16)$$

x) При рассмотрении системы, находящейся при конечной температуре добавляется условие $v_F x \ll 2\pi T$ (2.12') где T - температура, v_F - скорость Ферми свободных электронов.

где R, A означает запаздывающее и опережающее решения. Одноэлектронная плотность состояний может быть представлена в виде:

$$N(\varepsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\beta_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon, \beta_p) \quad (2.17)$$

где N_0 - плотность состояний свободных электронов. Непосредственные вычисления дают:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \begin{cases} \frac{4}{\pi} \left(\frac{\varepsilon}{2A}\right)^2 \left\{ E\left(\frac{2A}{\varepsilon}\right) - K\left(\frac{2A}{\varepsilon}\right) \right\} + \frac{4}{\pi} K\left(\frac{2A}{\varepsilon}\right) \\ \frac{4}{\pi} \left|\frac{\varepsilon}{2A}\right| E\left(\frac{\varepsilon}{2A}\right) \text{ при } \left|\frac{\varepsilon}{2A}\right| < 1, \text{ при } \left|\frac{\varepsilon}{2A}\right| > 1 \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \rightarrow \begin{cases} 1 \text{ при } |\varepsilon| \rightarrow \infty \\ \left|\frac{\varepsilon}{A}\right| \text{ при } |\varepsilon| \rightarrow 0 \end{cases}$$

где K и E - полные эллиптические интегралы 1-го и 2-го рода. Графически плотность состояний (2.18) показана на рис.9 (кривая I). Таким образом, мы получили псевдощель типа предлагавшейся из упомянутых выше качественных соображений. Подчеркнем, что функция Грина (2.16) не обладает особенностями полюсного типа в области энергий, соответствующей псевдощели и в этом смысле не описывает какого-либо спектра элементарных возбуждений. Условие (2.12) указывает на неприменимость полученных формул в непосредственной окрестности уровня Ферми, то есть в глубине псевдощели. При $R_c \geq 20a$, где a - межатомное расстояние, это ограничение распространяется на область $|\beta_p| \leq 0,05 \varepsilon_F$ (ε_F - энергия Ферми свободных электронов), что при типичных $|A| \sim 0,1 \div 0,2 \varepsilon_F$ составляет примерно 1/4 - 1/8 от ширины псевдощели. Ситуация улучшается с ростом R_c , однако обращение плотности состояний в нуль посредине псевдощели вызывает сомнения. Вместе с тем, для жидких полупроводников типична оценка $\Gamma \sim |A|$, так что условие (2.12) скорее всего выполнено при $R_c \geq 10a$. Поэтому детальное описание плотности состояний

вблизи середины псевдощели, возможно, не очень существенно.

Обобщение полученных результатов на случай трехмерной системы сталкивается с определенными трудностями. В частности, если мы воспользуемся обычным приближением локального псевдопотенциала, то есть $\langle p+q|V|p \rangle$ заметим на V_q , то при интегрировании по полярному углу между векторами p и q возникает характерное логарифмическое выражение (уравнение) для собственно-энергетической части существенно менее сингулярное в интересующей нас области энергий, чем (2.10), и приводящее лишь к слабым изменениям в плотности состояний в сравнении со случаем свободных электронов.^{x)}

$$\begin{aligned} x) \sum(\varepsilon p) &= \frac{V}{N} \int d^3q q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d \cos \theta \langle p+q|V|p \rangle^2 S(q) \times \\ &\times \left\{ \varepsilon + \mu - \frac{p^2}{2m} - \frac{q^2}{2m} - \frac{pq \cos \theta}{m} + i\delta \operatorname{Sign} \varepsilon \right\}^{-1} \approx \\ &\approx \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int d^3q q^2 |V_q|^2 S(q) \int_{-1}^1 d \cos \theta \times \\ &\times \left\{ \varepsilon + \mu - \frac{1}{2m} (p+K)^2 + 2pK \cos \theta + i\pi \operatorname{Sign} \varepsilon \right\}^{-1} = \\ &= A^2 \frac{m}{pK} \ln \left| \frac{\varepsilon + \mu - \frac{1}{2m} (p-K)^2}{\varepsilon + \mu - \frac{1}{2m} (p+K)^2} \right| - i\pi \operatorname{Sign} \varepsilon A^2 \frac{m}{pK} \times \\ &\times \left[\theta \left\{ \varepsilon + \mu - \frac{1}{2m} (p-K)^2 \right\} - \theta \left\{ \varepsilon + \mu - \frac{1}{2m} (p+K)^2 \right\} \right] \text{ где} \\ A^2 &\equiv \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int d^3q q^2 |V_q|^2 S(q) - \text{в предположении локальности псевдо-} \\ &\text{потенциала } \langle p+q|V|p \rangle \equiv V_q. \text{ Отсюда имеем оценку:} \\ |Re \sum(\varepsilon p)|_{\varepsilon \rightarrow \beta_p} &\sim A^2 \frac{m}{pK} \ln \left| \frac{p^2/2m - (p-K)^2/2m}{p^2/2m - (p+K)^2/2m} \right| \sim \frac{A^2}{4\varepsilon_F} \ln \left| \frac{\beta_p}{3\varepsilon_F} \right| \\ \text{где } \beta_p &\rightarrow 0 \text{ при } p \rightarrow p_c \sim K/2. \text{ Получим таким образом логарифмическую особен-} \\ &\text{ность. Аналогичная оценка в простейшем несамосоогласованном виде} \\ \text{в (2.10) дает: } |Re \sum(\varepsilon p)| &\sim \frac{1}{2} \frac{A^2}{|\beta_p|} \text{ то есть линейную разо-} \\ &\text{ходимость при } \beta_p \rightarrow 0. \text{ В этом смысле учитываемая ниже "когерентная"} \\ &\text{часть взаимодействия, обусловленная пиком } S(q) \text{ и пиком в угловом} \\ &\text{распределении рассеивающихся частиц доминирует над "некогерентной"} \\ &\text{частью, определяющейся постоянным (гладким) "фоном".} \end{aligned}$$

В работе 32 указывалось, что при определенных предположениях относительно высших корреляционных функций ионов (в частности четырехионной) возможно появление вкладов в электронную собственно-энергетическую часть, имеющих "одномерный" вид типа (2.10). Однако, эти предположения представляются слишком жесткими, тем более, что в настоящее время не существует теоретических или экспериментальных методов, которые позволили бы найти четырехионный коррелятор в жидкости.

Мы покажем, что достаточно наложить только одно условие на ионный псевдопотенциал, существенно основанное на его нелокальности, чтобы получить и в трехмерном случае результат типа (3.1). Впервые на необходимость учета нелокального характера псевдопотенциала при расчетах электронной структуры жидких металлов было указано в работе 30. Величина матричного элемента $\langle p+q | V | p \rangle$ для нелокального псевдопотенциала зависит от взаимной ориентации векторов p и q 33. К сожалению, подробные расчеты такой зависимости в литературе практически отсутствуют, однако из имеющихся работ следует, что в интересующей нас области $|q| \sim 2p_F$ псевдопотенциал, соответствующий рассеянию "почти назад" существенно больше, чем для рассеяния на меньшие углы 30,33. Типичная зависимость от угла рассеяния показана на рис.10. Поэтому мы предположим, что для интересующих нас веществ имеется ярко выраженный пик псевдопотенциала в области углов рассеяния $\theta \sim \pi$. Картина рассеяния (при $p \rightarrow p+q$) показана на рис.11. Тогда:

$$\begin{aligned} \sum (\epsilon p) &= \Omega_0 \int d^3q q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int d^1 \cos \theta |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \cdot \\ &\cdot \left\{ \epsilon - \sum_{|p+q|} (\epsilon; |p+q|) \right\}^{-1} \approx \\ &\approx A^2 \left\{ \epsilon - \sum_{|p|-|k|} (\epsilon; |p|-|k|) \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (2.19)$$

и задача сводится к "одномерной". Здесь

$$A^2 = \Omega_0 \int d^3q q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int d^1 \cos \theta |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \quad (2.20)$$

Мы предполагали выполненными условия (2.12), а интегрирование по

$\cos \theta$ считается эффективно обрезанным в интервале

$$\begin{aligned} |\delta \theta_{\max}|^2 &\ll \left| \frac{p-p_F}{p_F} \right| \\ |\delta \theta_{\max}|^2 &\ll \frac{2\pi T}{\epsilon_F} \quad (\text{для случая конечной тем-} \\ &\text{пературы}) \end{aligned} \quad (2.21)$$

вблизи $\theta \sim \pi$, что выделяет узкий конус, соответствующий доминирующей роли рассеяния назад. При $|p-p_F| \sim 0,05 p_F$ $|\delta \theta_{\max}| \ll 0,22$, так что рассеяние идет назад в конус с раствором $\theta \ll 13^\circ$. Учет конечной температуры смягчает это условие. Рассеяние на другие углы, соответствующее однородному "фону" на рис.10, приводит к появлению упоминавшихся выше слабых перенормировки плотности состояний и поэтому не учитывается.

Нетрудно видеть, что в трехмерном случае вместо (2.13) имеет место:

$$\sum_{|p|-|k|} 1 = - \sum_{|p|} 1 \quad \text{при } |p| \sim \frac{|k|}{2} \quad (2.22)$$

Дальнейшее рассмотрение совпадает с (2.14) - (2.18); все формулы остаются в силе и для трехмерной системы.

Выше считалось, что уровень Ферми (химпотенциал) $\mu_0 = \epsilon_F = \frac{\hbar^2 k^2}{4m}$ то есть проходит как раз посредине "псевдощели". Легко видеть, что наше рассмотрение справедливо при произвольном положении уровня Ферми $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$. Мы по-прежнему считаем, что начало отсчета энергии помещено в точке μ_0 и введем $\tilde{\epsilon} = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \mu_0$ удовлетворяющую (2.22). В полученных выше формулах надо лишь провести замену $\epsilon \rightarrow \epsilon + \Delta\mu$, где $\Delta\mu$ - смещение уровня Ферми относительно середины "псевдощели".

Нетрудно видеть, что приближение Эдвардса, использовавшееся выше, учитывает не все существенные диаграммы высших порядков теории возмущений. Ниже проводится рассмотрение, учитывающее все такие диаграммы $3I$. При этом считается, что задача уже сведена к эффективно одномерной (в смысле условий (2.12) и (2.21)). Приближение Эдвардса свободно от такого предположения и в нем условие (2.12) и (2.21) используются только при решении уравнений. Теперь эти условия будут использованы с самого начала, благодаря чему мы отсуммируем более широкий класс диаграмм. Нетрудно видеть, что в каждом порядке теории возмущений одинаковый вклад дают диаграммы с чередующейся последовательностью свободных гриновских функций $G_0(\epsilon p)$ и $G_0(\epsilon p - K)$ (мы рассматриваем $p \sim K/2$) и чередующейся последовательностью вершин с входящими или выходящими линиями взаимодействия, передающими импульс $\pm K$. Мы можем просуммировать все такие диаграммы методом, предложенным Л.В.Келдышем. Общий член соответствующего разложения функции Грина имеет вид:

$$g_n(\epsilon p) = \frac{A^{2n} n!}{(\epsilon - \frac{1}{2}p + i\delta \text{Sign} \epsilon)^n (\epsilon + \frac{1}{2}p + i\delta \text{Sign} \epsilon)^n (\epsilon - \frac{1}{2}p + i\delta \text{Sign} \epsilon)} \quad (2.23)$$

где A^2 определяется (2.11) или (2.20), множитель $n!$ появляется из простых комбинаторных соображений. В самом деле, имеется $2n$ точек, к которым прикрепляются линии взаимодействия. Из них n точек имеют выходящую линию, которая любым из $n!$ способов может войти в оставшиеся свободными n вершин, соответствующих входящим линиям. Используем тождество:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-z} (z^n) d^n z = \int_0^{\infty} d^n z e^{-z} \frac{1}{1-z} \quad (2.24)$$

Тогда одноэлектронная функция Грина есть:

$$G(\epsilon p) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\epsilon p) = \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{\epsilon + \frac{1}{2}p}{\epsilon^2 - \frac{1}{4}p^2 - zA^2 + i\delta \text{Sign} \epsilon} \quad (2.25)$$

Отметим, что (2.25) представляет собой т.н. нормальную функцию Грина идеального полупроводника, "усредненную" по флуктуациям энергетической щели:

$$G(\epsilon p) = \int dW \mathcal{P}\{W\} G_{sc}(\epsilon p p / W) \quad (2.25)$$

где распределение $\mathcal{P}\{W\}$ имеет вид:

$$\mathcal{P}\{W\} \equiv \frac{|W|}{A^2} e^{-\frac{W^2}{A^2}} \quad (2.26)$$

$$G_{sc}(\epsilon p p / W) \equiv \frac{\epsilon + \frac{1}{2}p}{\epsilon^2 - \frac{1}{4}p^2 - W^2 + i\delta \text{Sign} \epsilon} \quad (2.27)$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned} \text{Im} G^{R,A}(\epsilon \frac{1}{2}p) &= \mp \pi \int_0^{\infty} dz e^{-z} (\epsilon + \frac{1}{2}p) \delta(\epsilon^2 - \frac{1}{4}p^2 - zA^2) = \\ &= \mp \pi \frac{\epsilon + \frac{1}{2}p}{A^2} \theta(\epsilon^2 - \frac{1}{4}p^2) e^{-\frac{\epsilon^2 - \frac{1}{4}p^2}{A^2}} \end{aligned} \quad (2.28)$$

и плотность состояний (2.17) есть:

$$\begin{aligned} \frac{N(\epsilon)}{N_0} &= 2 \left| \frac{\epsilon}{A} \right| e^{-\frac{\epsilon^2}{A^2}} \left\{ -i \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi \left(i \frac{\epsilon}{|A|} \right) \right\} \equiv \\ &\equiv 2 \left| \frac{\epsilon}{A} \right| e^{-\frac{\epsilon^2}{A^2}} \text{Erfi} \left(\frac{\epsilon}{|A|} \right) \end{aligned} \quad (2.29)$$

где $\Phi(ix)$ - интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Графическая плотность состояний (2.29) представлена кривой 2 на рис. 5.

Имеем асимптотики:

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0} = \begin{cases} 1 & \text{при } |\epsilon| \rightarrow \infty \\ 2 \frac{\epsilon^2}{A^2} \rightarrow 0 & \text{при } |\epsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.30)$$

Мы видим, что плотность состояний, соответствующая функции Грина (2.25), имеет качественно тот же характер, что и рассмотренная выше в приближении Эдвардса. Различие в асимптотике при $\epsilon \rightarrow 0$ несущественно, так как уже отмечалось, что эта область либо вообще не описывается в наших приближениях, либо не представляет особого интереса в реальных условиях, когда $T \sim |A|$.

Для полноты приведем выражения для $Re G^{R,A}(\epsilon, \rho)$, соответствующие (2.25):

$$Re G^{R,A}(\epsilon, \rho) = \begin{cases} \frac{\epsilon + \rho}{A^2} e^{-\frac{\epsilon^2 - \rho^2}{A^2}} \overline{Ei} \left(\frac{\epsilon^2 - \rho^2}{A^2} \right) & \text{при } \epsilon^2 - \rho^2 \geq 0 \\ \frac{\epsilon + \rho}{A^2} e^{-\frac{|\epsilon^2 - \rho^2|}{A^2}} Ei \left(-\frac{|\epsilon^2 - \rho^2|}{A^2} \right) & \text{при } \epsilon^2 - \rho^2 < 0 \end{cases}$$

где $Ei(x)$, $\overline{Ei}(x)$ - интегральные показательные функции.

Нетрудно видеть, что эти выражения также не описывают какого либо спектра элементарных возбуждений вблизи "поверхности Ферми".

3. Локализация электронов в неупорядоченных системах

Одним из принципиальных положений модели МДФО является предположение о том, что электронные состояния в области энергий соответствующей "хвостам" зон (или в области псевдощели) являются локализованными. При этом вводится характерная энергия - "порог локализации" (см. рис. 2-3) так что электроны с энергиями в интервалах:

$$-\infty < \epsilon < E_c; E_c' < \epsilon < \infty \quad \text{/ Рис. 2 /}; \quad E_c < \epsilon < E_c' \quad \text{/ Рис. 3 /}$$

не могут диффундировать по всей системе, а локализованы в конечных пространственных областях (их волновые функции отличны от нуля только внутри этих областей).

Первое строгое рассмотрение такой ситуации было проведено на упрощенной модели Андерсоном в 1958 г. [2]. В дальнейшем Мотт

обобщил рассуждения Андерсона на более реалистические ситуации, но лишь качественным образом [1]. Позднее последовала дискуссия, в ходе которой высказывались сомнения в справедливости выводов Андерсона [34, 35], которая способствовала прояснению ряда тонких моментов теории [36-38]. Однако, основные выводы Андерсона остались без изменений.

Вопрос о локализации играет центральную роль в теории неупорядоченных систем и дальнейшее теоретическое рассмотрение должно вестись как в плане изучения модели Андерсона, так и в плане обобщения на случай реалистических моделей.

Перейдем к рассмотрению модели Андерсона. Рассмотрим решетку узлов в трехмерном пространстве, распределенных регулярно или случайным образом. Электрон, находящийся на узле j имеет энергию E_j , которая является стохастической переменной, распределенной в полосе энергий ширины W с распределением $\mathcal{P}(E_j)$. Кроме того, в системе вводится взаимодействие, матричные элементы V_{ij} которого перебрасывают электрон с узла на узел (V_{ij} также может быть стохастической переменной). Поместим электрон на некий выбранный узел ℓ в начальный момент времени $t=0$ и рассмотрим поведение его волновой функции со временем.

Теорема Андерсона состоит в том, что в случае V_{ij} , спадающего с расстоянием между узлами быстрее, чем $|R_{ij}|^{-3}$, при среднем его значении, меньшем некоторого критического $V_{crit} \sim W$, перенос в такой системе отсутствует в том смысле, что даже при $t \rightarrow \infty$ амплитуда волновой функции на узле ℓ конечна и быстро падает с расстоянием, то есть электрон локализуется.

Физический смысл этой теоремы связан с тем, что вероятность нایتуннелирования на уровень, соответствующий выбранному ℓ в смысле возможности (совпадения энергий), возрастает гораздо более медленно с расстоя-

нием от этого узла, чем уменьшается взаимодействие $V_{\ell m}$ с тем же расстоянием. Этот вывод указывает на неприменимость в данной ситуации простой аргументации, связанной с "золотым правилом", которое предсказывает, что электрон, помещенный на ℓ -й узел, туннелирует с него на узел m за время порядка :

$$\tau \sim \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \langle V_{\ell m}^2 \rangle \mathcal{N}(E_m) \right\}^{-1}$$

Мы приведем упрощенное рассмотрение модели Андерсона, данное Займаном [40]. Для простоты с самого начала предполагаем решетку регулярной, а взаимодействие считаем отличным от нуля только между ближайшими соседями. Итак, гамильтониан системы есть :

$$H = \sum_j E_j a_j^\dagger a_j + \sum_{\{ij\}} V_{ij} a_i^\dagger a_j \quad (3.1)$$

где E_j — случайные величины, распределенные по $\mathcal{P}(E_j)$ с шириной W . Уравнение Шредингера для амплитуды вероятности A_ℓ нахождения электрона на узле ℓ , есть :

$$i \frac{\partial}{\partial t} A_\ell = E_\ell A_\ell + \sum_m V_{\ell m} A_m \quad (3.2)$$

Гринаовская функция электрона $G_{\ell\ell'}(E)$ удовлетворяет уравнению

$$\{E - E_\ell\} G_{\ell\ell'}(E) - \sum_m V_{\ell m} G_{m\ell'}(E) = \delta_{\ell\ell'} \quad (3.3)$$

$E \rightarrow E + i\delta$

Естественно, нас будут интересовать сингулярности матрицы $G_{\ell\ell'}(E)$ и, в частности, "изолированный" полюс ее диагонального элемента $G_{\ell\ell}(E)$:

$$G_{\ell\ell}(E) = \frac{A_\ell}{E - \mathcal{E}_\ell} \quad (3.4)$$

который интерпретируется как собственное значение энергии \mathcal{E}_ℓ электрона, локализованного на ℓ -м узле.

Уравнение (3.3) можно записать как :

$$G_{\ell\ell'}(E) = \frac{\delta_{\ell\ell'}}{E - E_\ell} + \frac{1}{E - E_\ell} \sum_{\ell''} V_{\ell\ell''} G_{\ell''\ell'}(E) \quad (3.3')$$

Выделяя интересующий нас узел $\ell=0$, имеем :

$$G_{00}(E) = \frac{1}{E - E_0} + \frac{1}{E - E_0} \sum_{\ell'} V_{0\ell'} G_{\ell'0}(E) \quad (3.3'')$$

$$G_{\ell'0}(E) = \frac{1}{E - E_{\ell'}} \sum_{\ell''} V_{\ell'\ell''} G_{\ell''0}(E) \cong \quad (3.3''')$$

$$\cong \frac{1}{E - E_{\ell'}} V_{\ell'0} G_{00} + \frac{1}{E - E_{\ell'}} \sum_{\ell''} V_{\ell'\ell''} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''0} G_{00}(E)$$

Подставляя (3.3''') в (3.3'') получим разложение :

$$G_{00}(E) = \frac{1}{E - E_0} + \frac{1}{E - E_0} \left\{ \sum_{\ell'} V_{0\ell'} \frac{1}{E - E_{\ell'}} V_{\ell'0} + \sum_{\ell''} V_{0\ell''} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''0} + \dots \right\} G_{00}(E) =$$

$$= G_{00}^0(E) + G_{00}^0(E) \sum_{\ell''} \dots G_{00}(E) \quad (3.4')$$

где собственно-энергетическая часть определяется рядом:

$$\sum_{\ell''} \dots G_{00}(E) = \sum_{\ell'} V_{0\ell'} \frac{1}{E - E_{\ell'}} V_{\ell'0} + \sum_{\ell''} V_{0\ell''} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''0} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''0} + \dots \quad (3.4'')$$

Сравнивая (3.4) с (3.4') получаем ряд Бриллюэна-Вигнера для энергии \mathcal{E}_ℓ :

$$\mathcal{E}_\ell = E_\ell + \sum_{\ell'} V_{\ell\ell'} \frac{1}{E - E_{\ell'}} V_{\ell'\ell} + \sum_{\ell''} V_{\ell\ell''} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''\ell} \frac{1}{E - E_{\ell''}} V_{\ell''\ell} + \dots$$

$$\cong Y_\ell(\delta) + i\delta X_\ell(\delta) \quad (3.5)$$

Однако, если \mathcal{E}_ℓ комплексно, такое состояние будет затухать со временем, то есть электрон будет туннелировать с узла ℓ . Поэтому получаем условие локализации: мнимая часть \mathcal{E}_ℓ должна исчезать в пределе $\delta \rightarrow +0$.

Важное замечание 36. При изучении вопроса о локализации электрона в неупорядоченной решетке, следует иметь в виду, что из-за наличия в задаче случайной переменной E_j , ни один из узлов решетки не есть точная копия другого (в любой другой точке решетки или в любом другом элементе статистического ансамбля). Поэтому, вообще говоря, неверно изучать только средние по ансамблю (окажем $\langle G \rangle$), но следует рассмотреть статистические распределения для всех интересующих нас величин.

Итак, если в момент $t=0$ электрон помещен на узел m , то амплитуда его волновой функции есть:

$$A_n / t=0 = \delta_{nm} \quad (3.6)$$

Тогда

$$A_n(t) = i G_{nm}(t); \quad t > 0 \quad (3.7)$$

где

$$G_{nm}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{2\pi} e^{-iEt} G_{nm}(E)$$

Отсюда видно, что подстановка $G_{nm}(E)$ с "изолированным" комплексным полюсом E_m приведет к экспоненциальному затуханию $A_m(t)$ при $t \rightarrow \infty$ (полюс $G_{nm}(E)$ лежит в нижней полуплоскости). В случае вещественного E_m видим, что $A_m(t)$ осциллирует, не затухая. Амплитуда вероятности нахождения электрона на узле m равна по модулю единице, так что электрон все время локализован на этом узле (точнее, в его непосредственной окрестности).

Замечание об аналитических свойствах 36-38

Мы рассматриваем матричные элементы функции Грина:

$$G_{em} = \left(\frac{1}{E - H + i\delta} \right)_{em}$$

взятые по узельным волновым функциям ψ_e^1 и ψ_m^1 (задачи без возмущения), и, в частности, диагональный элемент:

$$G_{mm}(E) = \sum_{\alpha} |\langle m | \alpha \rangle|^2 \frac{1}{E - E_{\alpha} + i\delta} \quad (\text{по определению})$$

где точные волновые функции $|\alpha\rangle$ есть:

$$|\alpha\rangle = \sum_m \langle \alpha | m \rangle \psi_m$$

Мы видим, что полюсы $G_{mm}(E)$ на действительной оси суть собственные значения, связанные с узлом m , и ввиду нормировки ψ_m^1 сумма вычетов в этих полюсах, которая равна вероятности всех этих состояний, есть единица. При увеличении размеров системы до бесконечности, обычно рассматривают только две следующих возможности поведения этих полюсов:

- 1) в некоторой области энергий появляются истинные связанные состояния в виде изолированных полюсов;
- 2) в других областях энергий возникает "континуум" полюсов, то есть разрыв вдоль действительной оси, так что при $N \rightarrow \infty$ $\text{Im} G_{mm}(E + i\delta) = -\text{Im} G_{mm}(E - i\delta) =$ плотность полюсов. Это есть обычный случай непрерывного спектра. В то же время существует третья возможность, которая и реализуется в модели Андерсона (о смысле слов "изолированный полюс" см. выше);
- 3) Возникает дискретное (счетное) множество полюсов $G_{mm}(E)$, случайно распределенных по энергиям. При этом вычет в одном из этих полюсов порядка единицы, а вычеты остальных быстро спадают, так что N -й вычет имеет порядок $\exp\{-\beta N^{1/3}\}$, так как это есть амплитуда состояния локализованного на расстоянии $\sim N^{1/3}$. Итак, в пределе $N \rightarrow \infty$ функция $G_{mm}(E)$ имеет любопытные аналитические свойства, так как она имеет особенности всюду на той части действительной оси, которая соответствует разрешенным значениям энергии, но наиболее вероятное значение суммы вычетов в полюсах, попадающих в контур, окружающий отрезок ΔE действительной оси, имеет порядок величин

ны $\exp\{-\beta(\frac{W}{\Delta E})^{1/3}\}$. На расстоянии δ от действительной оси, наиболее вероятное значение $\text{Im } G_{mm}(E)$ пропорционально δ , и стремится к нулю при $\delta \rightarrow +0$, кроме как может быть на множестве меры нуль. Однако предел $\text{Im } G_{mm}(E)$ сам по себе не ограничен на любом конечном интервале действительной оси.

Все эти любопытные свойства сглаживаются при усреднении. Ввиду того, что $E_\ell, E_{\ell'} \dots$ есть стохастические переменные, ряд (3.5) должен быть проанализирован с точки зрения статистического распределения отдельных членов*. При этом, в соответствии с важным замечанием для нас существенно наиболее вероятное поведение ряда (3.5). В результате сложного статистического анализа I.2 Андерсону удалось показать, что с вероятностью единица ряд (3.5) сходится (при любом δ), если $\frac{W}{V} > (\frac{W}{V})_{crit}$. Это означает, что с вероятностью единица $X_\ell(\delta)$ конечно, так что в пределе $\delta \rightarrow +0$ мы получаем действительное E_ℓ , то есть локализацию при $\frac{W}{V} > (\frac{W}{V})_{crit}$.

* Рассмотрим член первого порядка в ряду (3.5). Выделяя из него мнимую часть, приходим к величине:

$$X_\ell(\delta) = \sum_{\ell'} \frac{|V_{\ell\ell'}|^2}{\delta^2 + (E - E_{\ell'})^2}$$

Индекс ℓ далее будем опускать за ненадобностью. Вероятностное распределение такой суммы может быть сосчитано методом Хольцмарка-Маркова 39. Оказывается, что:

$$\mathcal{P}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ixX} \varphi(x) dx$$

$$\varphi(x) = \exp\left\{-n \left\langle \int [1 - \exp\left(ix \frac{V^2(r)}{(E - E_\ell)^2 + \delta^2}\right)] d^3r \right\rangle\right\}$$

причем среднее $\langle \dots \rangle$ берется по распределению E_ℓ , определенному ниже в (3.12), n - плотность узлов решетки в пространстве. Все входящие сюда интегралы сходятся (при достаточно быстро спада-

ем с расстоянием взаимодействием $V(r) \sim r^{-s-\epsilon}$). Критическое значение отношения $\frac{W}{V}$, может быть оценено следующим образом 40. Рассмотрим различные члены порядка V^{L+1} в ряду (3.5), где L - большое целое число. Пусть выбранный узел решетки имеет Z ближайших соседей. Тогда имеется всего Z^L интересующих нас вкладов, каждый из которых есть произведение факторе типа:

$$T_{\ell'} = \frac{V}{E - E_{\ell'}} \quad (3.9)$$

Если предположить, что значения $E_{\ell'}$ в этих сомножителях векоррелируют между собой, мы можем оценить величину произведения, взяв среднее от его логарифма:

$$\langle \ln |T_\ell T_{\ell'} \dots T_{\ell^m}| \rangle = L \langle \ln |T| \rangle \quad (3.10)$$

Тогда ряд (3.5) в среднем ведет себя как геометрическая прогрессия и сходится абсолютно, если:

$$Z \exp\langle \ln |T(E)| \rangle \equiv F(E) < 1 \quad (3.11)$$

Это условие и определяет область энергий E , где электроны локализованы. Андерсон использовал следующее распределение величины E_ℓ :

$$\mathcal{P}(E_\ell) = \begin{cases} \frac{1}{W} & \text{при } |E_\ell| < \frac{1}{2}W \\ 0 & \text{при } |E_\ell| > \frac{1}{2}W \end{cases} \quad (3.12)$$

Тогда:

$$\langle \ln |T| \rangle = \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} \ln \left| \frac{V}{E - E_\ell} \right| dE_\ell \equiv F(E) = \quad (3.13)$$

$$= 1 - \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{2E}{W}\right) \ln \left| \frac{W}{2V} + \frac{E}{V} \right| + \left(1 - \frac{2E}{W}\right) \ln \left| \frac{W}{2V} - \frac{E}{V} \right| \right\}$$

Величина разброса энергий на узлах W , требующаяся для локализации, очевидно зависит от энергии E интересующего нас состояния. Рассмотрим состояния в центре зоны, где $E = 0$ (эти состояния труднее

этого локализовать). Тогда условие (3.11) упрощается до неравенства

$$\frac{W}{2V} > eZ \quad (3.14)$$

В частности, для простой кубической решетки $\frac{W}{B} > e$, где $B=2ZV$ — ширина зоны. Итак, $\left(\frac{W}{V}\right)_{crit} = 2eZ$

Более строгий анализ Андерсона, не использующий, в частности, предположения (фиктивного!) о статистической независимости E_c, E_c' ... в знаменателях общего члена ряда (3.5), дает несколько исправленное значение:

$$\left(\frac{W}{V}\right)_{crit} = 2eK \ln(eK) \quad (3.15)$$

где K — суть так называемые константы связности решетки (для любой из 3-мерных упорядоченных решеток $K \approx 2/3 Z$).

Для произвольного E в зоне условие локализации (3.11) может быть проанализировано численно. Общая качественная ситуация иллюстрируется на рис.12 (заштрихованы области локализации) 40. Принципиальным моментом для нас является появление критических энергий E_c и E_c' . Естественное, что с ростом неупорядоченности, локализация начинается с краев зоны.

Приближения, используемые при анализе модели Андерсона, не затрагивают вывод о существовании критических энергий, но, как видно из предыдущего, положения этих энергий в зоне, также как и величина $\left(\frac{W}{V}\right)_{crit}$ зависят от того, с какой степенью точности анализируется сходимость ряда теории возмущений. На рис.13, приведен график $\left(\frac{W}{2V}\right)_{crit}$ из работы Андерсона, соответствующий "наилучшей оценке", проведенной с помощью наиболее аккуратных расчетов.

В последнее время в ряде работ $\left(\frac{W}{V}\right)_{crit}$ определялась заново, 37,38, причем получались результаты, отличные от андерсоновских в сторону облегчения локализации. Однако в недавней работе 41 утверждается,

что наиболее точные оценки приводят к результатам, практически совпадающим с результатами Андерсона.

Следует отметить появление работ, где проблема локализации анализируется не в модели Андерсона, а в более реалистичной (по крайней мере для жидких полупроводников) задаче об электроны в системе случайных рассеивающих центров 42-44. При этом рассматривается электрон вблизи дна зоны проводимости. Используется формулировка теории на языке Фейнмановского интеграла по траекториям, причем строится некоторая сложная самосогласованная схема оценки этого интеграла. Например, в 44 Фейнмановский интеграл по траекториям представляется в виде континуального интеграла по вспомогательному полю, которое, как оказывается (случайные, хаотически расположенные в пространстве рассеиватели) эквивалентно гауссовскому случайному полю, действующему на электроны проводимости^x). Континуальное интегрирование, при этом, сводится к усреднению по этому полю. Континуальный интеграл вычисляется с помощью метода "стационарной фазы", "стационарное решение" определяет самосогласованное поле, действующее на электрон (функция Грина электрона в произвольном внешнем поле берется в ВКБ-приближении). Оказывается, что это поле представляет собой потенциальную яму:

$$\phi(r) \sim r^{-1/3} \quad (3.16)$$

и, таким образом, имеется дискретный спектр, соответствующий электронам, локализованным в области энергий $E < E_c$. При этом радиус локализации вблизи порога ведет себя как:

$$R_{loc} \sim |E - E_c|^{-2/3} \quad (3.17)$$

^x) Отметим, что сформулированная таким образом задача об электроны в неупорядоченной системе математически аналогична некоторой задаче теории полимеров 45.

а вероятность локализации, то есть плотность вероятности для электрона с энергией E вернуться в своему начальному положению (в координатном пространстве) за бесконечное время есть :

$$P_{loc} \sim \begin{cases} |\varepsilon - E_c|^{1/2} & ; \varepsilon \leq E_c \\ 0 & ; \varepsilon > E_c \end{cases} \quad (3.18)$$

Отметим, что в работах 43 и 44 получено несколько различное поведение радиуса локализации. Например, формула, аналогичная (3.17), в работе 43 имеет вид :

$$R_{loc} \sim |\varepsilon - E_c|^{-5/2} \quad (3.19)$$

хотя самосогласованное поле, в котором находится локализованный электрон, и здесь имеет характер (3.16)^x. В 45 кроме того анализируется и "спектр" электрона в области $\varepsilon \gtrsim E_c$. Оказывается, что понятие спектра элементарных возбуждений, как и следует ожидать, отсутствует (действительная часть спектра порядка мнимой), причем

$$Re \varepsilon_p \sim Im \varepsilon_p \sim \rho^{5/2} \quad (3.20)^{xx}$$

что разительно отличается от случая свободной частицы $\varepsilon_p \sim \rho^2$. Теория возмущений, применимая вдали от дна зоны, дает $\varepsilon_p \sim \frac{\rho^2}{2m} + \text{возмущение}$. Мы видим, что вблизи порога локализации возникает эффективно "сильная связь", так что возмущение полностью "сокращает" член $\sim \rho^2$ и само определяет поведение одноэлектронной функции Грина.

В связи с этим мы хотели бы отметить, что описание электрона, находящегося вблизи "порога локализации" вряд ли может быть проведено в рамках приближения самосогласованного поля. По-видимому,

x) Различие в результатах, по-видимому, связано с различным определением радиуса локализации в работах 43 и 44.

xx) Точнее $\varepsilon_p \approx (1 - i\sqrt{3}) \frac{W^{1/2}}{m^{1/2}} \rho^{5/2}$, где $W \sim \rho V^2$
 ρ - плотность рассеивателей, V - характеристическая величина потенциала рассеивателя.

имеется глубокая аналогия между ^{этой} задачей и проблемой описания критических явлений в теории фазовых переходов 2-го рода 46, так что флуктуации самосогласованного поля становятся все более существенными по мере приближения к критической энергии, меняя радикально величину соответствующих "критических индексов" в формулах типа (3.17) - (3.19).

В заключение отметим, что в настоящее время отсутствует сколько-нибудь строгое рассмотрение вопроса о локализации электронов в модели "жидкого полупроводника" с псевдощелью, исходящей из картины почти свободных электронов типа обсуждавшейся выше в разделе 2.

4. Вопросы электронной кинетики

Обычное описание кинетических явлений в твердых телах, основанное на представлении об электронах, как хорошо определенных квазичастицах и на уравнениях типа уравнения Больцмана, совершенно неприменимо для описания электронов в неупорядоченных системах, где, как мы видели, практически всегда отсутствует само понятие о спектре элементарных возбуждений. (Единственным исключением является, по-видимому, случай жидких нормальных металлов).

Как отмечалось уже в самых ранних работах по теории электронов в неупорядоченных системах, здесь возникает проблема описания кинетики в ситуации, когда длина свободного пробега становится сравнимой или даже меньшей среднего межатомного расстояния. Такая ситуация естественно возникает для электронов с энергиями, относящимися к области псевдощели (или "хвоста") и только слегка превышающими порог локализации, имевший смысл порога подвижности. При этом для описания подвижности в литературе обычно вводятся две качественные модели (Мотт и Коэн), практически приходящие к одним и тем же ре-

результатам, предполагающие поведение подвижности типа изображенного на рис.14 (а и б).

Таким образом, Мотт предполагает существование минимальной подвижности металлического типа, после которой электроны локализируются и происходит скачкообразный срыв подвижности на 2-3 порядка в активационной (прыжковой) подвижности. Коэн, с другой стороны считает, что скачок в швале подвижностей отсутствует, а вместо него существует область т.н. диффузионной подвижности.

Естественно, что если мы предположим падение подвижности на несколько порядков в области локализации, то для электропроводности получится:

$$\sigma \sim e^{-\frac{E_c' - E_c}{T}} \quad (4.1)$$

Мы видим, что для проводимости определяющими являются энергии E_c и E_c' , то есть так называемые "границы подвижности" (пороги подвижности) 15. Соответственно, величина $\Delta = E_c' - E_c$ называется "целью подвижности". Наконец заметим, что границы областей непрерывности плотности состояний (E_B и E_B' на рис.4) не играют тут особой роли. Как случай на рис.3а, так и рис.3в приводят к σ из (4.1). Поэтому "возная структура" неупорядоченной системы может и не содержать энергетической цели, но зато содержит цель подвижности 15.

Оценка минимума металлической проводимости, то есть проводимости посредством делокализованных электронов, может быть проведена согласно Мотту, следующим образом (при температуре $T=0$) 1. Исходим из формулы Кубо-Гринвуда, которая для статической проводимости при $T=0$ дает:

$$\sigma_E(0) = \left(\frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \right) |\mathcal{D}_E|_{AV}^2 \{N(E)\}^2 \quad (4.2)^x$$

x) $\mathcal{D}_E = \int \psi_{E'}^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_E d^3x$ ($E=E'$) и "AV" - означает усреднение по E и E' при условии $E=E'$.

Ω - объем системы, ($E = E_F$).

К выводу (4.2). Пусть на электрон действует электрическое поле $F \cos \omega t$, так, что соответствующая потенциальная энергия есть $e x F \cos \omega t$. Тогда вероятность перехода из состояния с энергией E в любое из состояний энергии $E + \hbar \omega$ есть:

$$\frac{1}{4} e^2 F^2 \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) |\chi_{E+\hbar\omega, E}|_{AV}^2 \Omega N(E+\hbar\omega) \quad (4.3)$$

где

$$\chi_{E', E} = \int \psi_{E'}^* \chi \psi_E d^3x$$

AV - означает усреднение по всем состояниям с энергией возле $E' = E + \hbar \omega$

Удобно записать

$$\chi_{E+\hbar\omega, E} = \frac{\hbar}{m\omega} \mathcal{D}_{E+\hbar\omega, E}$$

где

$$\mathcal{D}_{E', E} = \int \psi_{E'}^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_E d^3x$$

так что (4.3) принимает вид:

$$\frac{\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{2m^2 \omega^2} F^2 |\mathcal{D}|_{AV}^2 N(E+\hbar\omega) \quad (4.3)$$

Проводимость $\sigma(\omega)$ определяется так, чтобы $\sigma(\omega) \frac{1}{2} F^2$ давало средние потери энергии в единицу объема. Для этого надо с помощью (4.3) записать поглощаемую энергию. Тогда находим:

$$\begin{aligned} \sigma(\omega) &= \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2 \omega} \int \{ f(E) [1 - f(E+\hbar\omega)] - f(E+\hbar\omega) [1 - f(E)] \} \times \\ &\quad \times |\mathcal{D}|_{AV}^2 N(E) N(E+\hbar\omega) dE = \\ &= \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \int \frac{f(E) - f(E+\hbar\omega)}{\hbar\omega} |\mathcal{D}|_{AV}^2 N(E) N(E+\hbar\omega) dE \end{aligned}$$

При $T=0$ это дает

$$\sigma(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} \int_{E_F - \hbar\omega}^{E_F} \frac{|\mathcal{D}|_{AV}^2 N(E) N(E+\hbar\omega)}{\hbar\omega} dE$$

В пределе $\omega \rightarrow 0$:

$$\sigma_{E_F}(0) = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^2} |\mathcal{D}|_{AV}^2 \{N(E)\}^2 \Big|_{E=E_F} \quad (4.2)$$

При $T \neq 0$

$$\sigma(\omega) = - \int G_c(\omega) \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} d\epsilon \quad (4.2')$$

Когда длина свободного пробега $\ell \gg a$, межатомного расстояния, из (4.2) следует:

$$\sigma \approx \frac{ne^2}{m} \tau = \frac{e^2 S_F}{12\pi^3 k} \ell \quad (4.2)$$

($S_F = 4\pi p_F^2 / \hbar^2$). нас однако, интересует случай $E_F \sim E_c$ когда, очевидно $\ell \leq a$! Мы приведем оценку для рассмотренной выше модели Андерсона. Считаем, что при $E_F \sim E_c$ фазы волновых функций электронов на соседних узлах не коррелируют. Тогда:

$$\phi \approx N^{1/2} \delta \quad \text{где}$$

$N = \frac{\Omega}{a^3}$ - число узлов в объеме Ω ; $\delta = \int \psi_1^* \frac{\partial}{\partial x} \psi_2 dx$, где интегрирование ведется уже по объему, приходящемуся на один узел ($\sim a^3$).

Принимается грубая оценка

$$\delta \sim \left(\frac{m}{m^*} \right) \frac{\hbar a^3}{\Omega} \quad (4.4)$$

Такой порядок δ имеет в периодической решетке (m^* - эффективная масса электрона), k - волновое число электрона. Тогда:

$$|\phi|_{Av}^2 \approx \frac{\Omega}{a^3} \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^6}{\Omega^2} \quad (4.5)$$

Если $k \sim \frac{\pi}{a}$, то

$$|\phi|_{Av}^2 \approx \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \frac{\pi^2 a}{\Omega} \quad (4.6)$$

и получаем

$$\sigma_{E_F}(0) \approx \left(\frac{2\pi^3 e^2 \hbar^3 a}{m^{*2}} \right) \{N(E_F)\}^2 \quad (4.7)$$

Введем $\frac{\hbar^2}{2m^* a^2} \sim V$ - интеграл перекрытия, (обозначения те же, что и в нашем рассмотрении модели Андерсона). Тогда

$$\sigma_{E_F}(0) \approx \left(\frac{8\pi^3 e^2}{\hbar a} \right) \left(\frac{V}{W} \right)^2 \quad (4.8)$$

Из рис. 13 видим, что переход Андерсона, то есть локализация всех состояний в зоне проводимости, происходит при

$$W = 60V \quad (4.9)$$

для решетки с $Z=6$. Поэтому для системы с уровнем Ферми, лежащим в середине зоны, минимальная "металлическая" проводимость

$$\sigma_0 \approx 0,06 \frac{e^2}{\hbar a} \quad (4.10)$$

Недавно Мотт провел оценку σ_0 заново [47], используя другие значения $\left(\frac{W}{V} \right)_{crit}$ и более точную оценку δ . При этом в (4.10) 0,06 заменилось на 0,025^х). Однако, как отмечалось, андерсоновская оценка $\left(\frac{W}{V} \right)_{crit}$ остается, по-видимому, лучшей, и мы придерживаемся оценки (4.10).

На языке подвижностей имеем следующие грубые оценки [5]. Нижняя граница длины свободного пробега ℓ , для которой еще справедлива картина квазисвободного распространения с случайным рассеянием, равна примерно межатомному расстоянию. Соответствующая подвижность $\mu \sim 5 \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$. В области локализации подвижность может осуществляться "перескоковым" механизмом и соответствующий верхний предел $\mu \sim 10^{-2} \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$. Таким образом, имеем падение примерно на 2,5 порядка. Для $Z \neq 6$ (4.10) следует домножить на $(6/Z)^2$. Для $a \approx 4\text{Å}$ (4.10) $\approx 350^{-1} \text{ ом см}^{-1}$. Мотт отмечает, что оценка (4.10) дает минимальную проводимость во всех случаях $E \sim E_c$, если вместо a написать a_E - расстояние между локализованными состояниями. Металлическая проводимость, по идее, должна слабо ва-

х) Следует заметить, что ввиду грубости предположений, используемых при получении (4.10), вряд ли стоит отнестись всерьез к попыткам уточнить численный множитель в этой формуле. Надо надеяться, что (4.10) дает правильную оценку хотя бы по порядку величины.

висоте от температуры. Срыв ее на пороге локализации приводит к активационной проводимости. Происходит-ли это скачком или постепенно (ср. рис. I4а) на наш взгляд не очень существенно, так как в реальной ситуации ($T \neq 0$) и физическая картина подвижности должна иметь вид, как на рис. I4в. ^{x)}

Физическую картину движения носителей в области энергий вблизи порогов подвижности или в области псевдозапрещенной зоны без полной локализации, по-видимому, лучше описывать с помощью представления о "длине когерентности фаз" l_5 , чем с помощью длины свободного пробега. В идеальном кристалле блоховская волна

$$\psi(r) = U_{kn}(r) e^{ikr} \quad (4.11)$$

обладает полной фазовой когерентностью. Зная фазу в одной точке кристалла, можно определить ее в любой точке, если только известен волновой вектор k . В неидеальном кристалле из-за многократного рассеяния естественно ожидать:

$$\psi = \sum_k a_k \psi_k \quad (4.12)$$

где a_k имеют хаотические фазы и примерно один порядок на поверхности постоянной энергии в k -пространстве, размазанной в интервале $\Delta k \sim l^{-1}$. Поскольку волновая функция здесь зависит от хаотических конфигураций дефектов, удобно рассматривать вместо нее коррелятор вида:

$$\langle \psi^*(r+R) \psi(r) \rangle \sim \frac{e^{-R/l}}{R} \quad (4.13)$$

x) В "видных полупроводниках" электронные состояния вообще не могут быть локализованы в строгом смысле, так как $T \neq 0$ и атомы кристалла все время находятся в состоянии теплового движения и взаимной диффузии, что приводит к картине меняющегося во времени (хотя и достаточно медленно) потенциального поля.

где усреднение проводится по ансамблю упомянутых хаотических конфигураций, а величина l_5 и есть "длина когерентности фаз" (которая в данном случае порядка l). Когда l и l_5 в сильно неупорядоченной системе становятся меньше межатоминого расстояния, l теряет физический смысл, тогда как $l_5 < a$ просто означает некогерентность фаз ψ на расстояниях больших a . При $l_5 \ll a$ фазы полностью некогерентны и не может быть волнового распространения в обычном смысле. Амплитуда перехода из точки r в r' за время t всегда может быть представлена в виде суммы амплитуд перехода по всевозможным путям, которые, вообще говоря, сильно интерферируют в случае волнового характера распространения. В случае же полностью хаотических фаз всякое усреднение или суммирование вкладов из различных областей в пространстве уничтожит все интерференционные вклады, так что вероятность любого перехода представится суммой вероятностей переходов по различным путям. Соответственно движение электрона в такой системе представляет собой броуновское движение. Тогда имеем соотношение Эйнштейна:

$$\mu = \frac{eD}{T} \quad (4.14)$$

где коэффициент диффузии представляется в виде

$$D \approx \frac{1}{6} \gamma a^2 \quad (4.15)$$

где γ - средняя скорость "усмакивания" носителя о данного атома, которая может быть выражена через ширину зоны:

$$\gamma \approx \left(\frac{ZV}{\hbar} \right) f \quad (4.16)$$

где $f_0 \leq 1$. Отсюда $\mu \approx 18 \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$ для $Z=3$, $V \sim 1 \text{ эВ}$, $a \sim 3 \text{ \AA}$ и $T \approx 300^\circ \text{К}$. Поэтому шкала подвижностей в неупорядоченных системах при комнатной температуре выглядит следующим образом: I5 Приближенная: $\mu \approx 10^{-2} \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$ (локализованные электроны)

Броуновская $10^{-2} \text{ см}^{-2}/\text{вольт.сек} < \mu < 5 \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$ (делокализованные электроны, $\ell \leq a$)

Металлическая $\mu > 5 \text{ см}^2/\text{вольт.сек}$ (делокализованные электроны, $\ell > a$)

Подчеркнем еще раз, что броуновская картина, по-видимому, необходима при приближении к порогу подвижности со стороны делокализованных состояний, когда последние принимают все более резонансный характер, приближаясь к локализованному виду. Подобное рассмотрение может оказаться очень полезным для большой группы "жидких полупроводников", где состояния в псевдозапрещенной зоне вряд-ли имеют полностью локализованный характер. Тем не менее теоретическое рассмотрение "диффузионной" подвижности на основе квантовой теории неупорядоченных систем до настоящего времени отсутствует.

Вслед за Загманом 48, ряд авторов рассматривал кинетические свойства электронов с энергией $E \geq E_c$ с помощью классических представлений "теории протекания". Если $P(E)$ - есть зависящая от энергии электрона часть объема системы, которая является "разрешенной" из классических энергетических соображений, то проводимость представляется в виде:

$$\sigma(E) = \mu(P(E)) P(P(E)) \quad (4.17)$$

где $P(p)$ - "вероятность протекания" то есть часть "разрешенного" объема, образования "каналами", пронизывающими систему насквозь.

Типичный вид зависимости $P(p)$ представлен на рис.15:

$P(p) = 0$ при $p < p_c$ - где p_c - определенное критическое значение; $P(p) \rightarrow 1$ при $p \rightarrow 1$. Порог подвижности определяется уравнением

$$P(E_c) = p_c \quad (4.18)$$

Казалось бы возникает простое описание. Однако, проведенные в последнее время исследования 49,51, бросают тень сомнения на упрощен-

ный вариант такого рассмотрения^{х)}. Предпринятое в этих работах либо экспериментальное исследование, либо машинный эксперимент свидетельствует о том, что ход $\sigma(E)$ не имеет ничего общего с зависимостью $P(p(E))$ (см.рис.15). Зависимость $\sigma(E)$ можно понять; если $\mu(p)$ плавно стремится к нулю при $p \rightarrow p_c$. Фактическая зависимость имеет вид: 51

$$\sigma(p) = A (p - p_c)^2 \quad (4.19)$$

Объясняется такое поведение подвижности, по-видимому, тем, что при $p \sim p_c$ многие из классических разрешенных каналов в системе либо "заперты" на концах, либо имеют "узкие" места.

Интересно отметить, что предположение (4.19) о $p(E)$ определяемым очевидной формулой для "гауссовского" случайного поля

$$p(E) = (2\pi E_0^2)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \exp\{-\frac{(\epsilon - E_c)^2}{2E_0^2}\} \quad (4.20)$$

где E_0^2 - средний квадрат флуктуации поля, используемое для описания $\sigma(T)$ (температурно-зависимой электропроводности) в виде:

$$\sigma(T) = \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \sigma(\epsilon) f(\epsilon) [1 - f(\epsilon)] \quad (4.21)$$

где $f(\epsilon)$ - ферми-распределение, позволяет "симулировать" моттовский закон I "прыжковой" проводимости: ^{ix)}

х) Часто (в духе существования резкого порога подвижности) предполагается, что $\mu(p) \neq 0$ при $p \geq p_c$ причем

$$\mu \sim \mu_{металл} \sim const, \text{ так что } \sigma(E - E_c) \sim P(p(E))$$

xx) Вывод закона (4.22), основанный на представлении о прыжках между локализованными состояниями в идеологии теории протекания см. в работе 52.

$$\sigma \sim \exp \left\{ -\frac{A}{T^{1/4}} \right\} \quad (4.22)$$

в широком интервале температур 5I (100-300°K). Впрочем, еще лучше симулируется закон

$$\sigma \sim \exp \left\{ -\frac{A'}{T^{1/4}} \right\} \quad (4.23)$$

что выполняется в интервале температур 100-1200°K, при ином (меньшем) выборе E_0 . (При маленьком E_0 симулируется даже $\sigma \sim \exp \left\{ -\frac{A''}{T} \right\}$). Эти результаты указывают на то, что $\ln \sigma \sim T^{-1/4}$ поведение), в частности наблюдаемое на эксперименте возможно, является следствием большого хвоста в плотности состояний вместе с отсутствием реального порога подвижности, что противоречит традиционной интерпретации.

Перейдем к обзору попыток последовательного теоретического описания электропроводности, исходящего из "металлической" картины почти свободных электронов в ситуации с ярко выраженной псевдощелью, типа обсуждавшихся в разделе 2. В обычной модели "почти свободных" электронов I9

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau \quad (4.24)$$

Учтем, что

$$\tau = \frac{\ell}{v_F} = \frac{m^* \ell}{p_F}; \quad n = \left(\frac{8\pi}{3} \right) \left(\frac{p_F}{2\pi\hbar} \right)^3 \quad (4.25)$$

Тогда :

$$\sigma = \frac{e^2 S_F \ell}{12\pi^3 \hbar} \quad (4.26)$$

где $S_F = 4\pi p_F^2 / \hbar^2$. Эта формула получена в предположении электронного спектра $\epsilon_p = p^2 / 2m^*$ и из (4.26) видно, что для заданного ℓ , σ не зависит от m^* и, таким образом, от плотности электронных состояний при $E = E_F$. Естественно, считается, что $\frac{p_F}{\hbar} \ell \gg 1$. Справедливо, как это согласовать с общим результатом (4.2) ? Выше мы

видели, что матричный элемент \mathcal{D} , входящий в (4.2), содержит m^* в знаменателе (см. (4.4)), так что при $\ell \gg a$ $\mathcal{D} \sim m^{*-1}$, $N(E_F) \sim m^*$ (для "свободных" электронов) и m^* сокращается в формуле для σ . В случае, когда $N(E_F)$ падает в сравнении со своим свободным значением и образуется псевдощель, эффективная масса электрона вряд ли имеет явный смысл (мы видели, что само понятие спектра электронных возбуждений ставится при этом под сомнение). Спектр во всяком случае сильно размыт: $\frac{\Delta p}{p_F} \sim 1$, так что вместо (4.4) скорее всего имеем оценку $\left(\frac{a^3}{S} \right) \frac{1}{a}$. Введем отношение :

$$g = \frac{N(E_F)}{N_0} \quad (4.27)$$

$g < 1$ в области псевдощели. Мотт предлагает следующее обобщение (4.26) на рассматриваемый случай: I

$$\sigma = \frac{e^2 S_F \ell}{12\pi^3 \hbar} g^2 \quad (4.27)$$

где ℓ имеет смысл не длины свободного пробега, а скорее длины фазовой когерентности, обсуждавшейся выше.

Если $\ell \sim a$, мы имеем

$$\sigma \approx \frac{e^2 S_F}{12\pi^3 \hbar} a g^2 \quad (4.28)$$

Учитывая $S_F = 4\pi (3\pi^2)^{2/3} \frac{1}{a^2}$

для одного электрона на атом получаем:

$$\sigma \approx \frac{e^2}{3a\hbar} g^2 \quad (4.29)$$

Для $a \sim 3\text{\AA}$ и $g = 1$ имеем $\sigma \sim 1500 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. Для двухвалентного металла (4.29) нужно домножить на $2^{2/3}$, что дает $2500 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ (при $a \sim 3\text{\AA}$ $g = 1$). Выше (ср. (4.10)) мы видели, что локализация происходит при $\sigma \sim 0,06 \frac{e^2}{a\hbar}$ (для модели Андерсона). Сравнивая (4.29) и (4.10) видим, что разумной оценкой для условия локализации элект-

ронных состояний в "псевдощели" является $g_c^2 \approx 0,2$ то есть ^{x)}
 $g_c \approx 0,45$ (4.30)

Мы хотим подчеркнуть, что особых теоретических причин для введения обобщения типа (4.27) не существует. Более того, расчеты модели "почти свободных электронов" показали, что учет изменения плотности состояний приводит к изменению эффективной длины свободного пробега таким образом, что $\ell \rightarrow \ell_{\text{эман}}/g^2$ и фактор g^2 в (4.27) сокращается в 28. Однако эти расчеты оправданы лишь при условии $\frac{p_F}{\hbar} \ell \gg 1$, то есть не в том случае, который нас интересует. ^{xx)}

Нарушение рассматриваемой "теоремы сокращения" Эдварда при $\frac{p_F}{\hbar} \ell \sim 1$, (или, возможно, при $\frac{p_F}{\hbar} \lambda \sim 1$) по-видимому, связано с сильным возмущением волновых функций электронов в области псевдощели, что приводит к отличию электронного тока в данном квантовом состоянии от простого произведения заряда на групповую скорость: $j_F = g e v_c$ для электрона на уровне Ферми. Проводимость в таких условиях следует рассматривать в модели "хаотических фаз" Мотта-Коэна, обсуждавшейся выше в связи с (4.12)-(4.14). Простая модель такого рода анализировалась в работе Фридмана ⁵⁵, где для проводимости был получен результат типа (4.28) с явной зависимостью от квадрата истинной плотности состояний на уровне Ферми.

Как уже упоминалось в разделе 2, в работе ¹⁷ проводились НМР эксперименты с жидкими In_2Te_3 , Ga_2Te_3 . При этом с ростом температуры было обнаружено изменение g в широких пределах ^{xxx)}, что указывает в зависимости от оценки (4.10) g_c колеблется в пределах $g_c \sim 0,2 - 0,5$.

xx) Простая интерпретация этого результата дана в работе ⁵⁴.

xxx) Из качественных соображений, связанных с представлениями о разрушении ближнего порядка с ростом температуры, ясно, что при нагревании $g \rightarrow 1$, так что наблюдается плавный переход полупроводник-металл (см. напр., ⁵³).

ывало на образование псевдощели и на возможность "управления" ее глубиной. Одновременно, измерение относительного увеличения скорости спин-решеточной релаксации η позволяло изучить зависимость времени "оседлости" электрона на данном ядре от g . Соответствующие результаты представлены на рис.16 вместе с графиком $\sigma(g)$. Наблюдалось довольно резкое изменение в наклоне этих кривых в районе:

$$g_c = 0,18 \pm 0,03 \quad (4.31)$$

и это значение g_c интерпретировалось как порог локализации (не в строгом смысле этого слова), что находится в качественном согласии с оценками Мотта, которые колеблются в области $g_c \sim 0,2 - 0,5$. При этом $\sigma_c \approx 200 \pm 70$ (ом.см)⁻¹. Область $g_c \leq g \leq 0,5$ интерпретируется как переходная область "броуновской" подвижности. Переход от "броуновской" подвижности к "металлической", по-видимому, наблюдается в области $\sigma \sim 1500$ (ом.см)⁻¹, так что зависимость степени локализации от проводимости представляется графиком рис.17, основанном на экспериментальных данных.

Из зависимости $\sigma(g)$ рис.16 видно, что формулу (4.27) вряд ли можно буквально применять для обработки экспериментальных данных. В "броуновской" области имеем:

$$\sigma \approx 2 N(E_F) \Omega_0^{-1} T e \mu \quad (4.32)$$

где Ω_0 - атомный объем,

$$\mu \approx \frac{1}{6} \frac{e d^2}{\tau} \quad (4.33)$$

где d - а-длина "броуновского" скачка, τ - время скачка ($\sim \tau_e$).

Тогда:

$$\sigma = \frac{1}{3} \left(\frac{e^2 d^2}{\Omega_0} \right) \frac{N(E_F)}{\tau_e} \quad (4.34)$$

Сравнивая с формулой для $\eta \sim \frac{\tau_e}{\hbar N(E_F)}$ получим

$$\sigma \eta = \sigma_0 = \frac{e^2 d^2}{3 \Omega_0 \hbar} \quad (4.35)$$

$\frac{d^2}{\Omega_0} \sim \frac{a^2}{\Omega_0}$ мало меняется от жидкости к жидкости, то есть σ_0 примерно для всех жидкостей, находящихся в режиме "броуновской" подвижности ($\sigma_0 \sim 1500 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ для $d \sim 2,5 \text{ \AA}$, $\Omega_0 = 35 \text{ \AA}$). Из (4.35) следует, что в "броуновской" области $\eta \sim \sigma^{-1}$. Это подтверждается графиком рис.17. В области локализованных состояний d может быть больше a , но большие величины τ ведут к подвижностям меньшим "броуновских". (Из графика видно, что $\eta \sim \sigma^{-1}$ и здесь!). Таким образом, экспериментальная картина качественно согласуется с теоретическими спекуляциями, проведенными выше.

В настоящее время не существует даже серьезных качественных соображений относительно природы эффекта Холла в "жидких полупроводниках". Однако более или менее ясно, что знак константы Холла должен быть отрицательным, то есть соответствовать электронному эффекту Холла 7,8, так как в существующих теориях энергетического спектра "жидких полупроводников" грубо говоря нет места для "дырок" и описание всегда должно вестись на языке электронов. Но очень удивительно и то, что величина константы Холла получается по порядку величины соответствующей случаю почти свободных "электронов", так как по крайней мере в элементарной кинетической теории эффект Холла "недиссипативен" (то есть не зависит от столкновений электронов с решеткой) и может быть получен вообще без учета рассеяния. Вместе с тем в условиях, когда понятие спектра элементарных возбуждений отсутствует, константа Холла может существенно перенормироваться, например в духе предложения Займана 54

$$R = \frac{C}{\pi e c} \frac{1}{g} = C \frac{R_0}{g} \quad (4.36)^x$$

x) формула (4.36) была получена также в работе 55 для модели, основанной на представлении о хаотических фазах волновых функций электронов соседних атомов (длина когерентности порядка межатомного расстояния).

Идея Займана состоит в том, что для качественного понимания кинетики в условиях сильного рассеяния следует во всех формулах электронной кинетической теории, например, в уравнении Больцмана, заменить электронную скорость V_k на j_k/e , где j_k - ток в состоянии, описываемом возмущенной волновой функцией $\psi_k(r)$, представляющей из себя суперпозицию типа (4.12) $j_k = \frac{e \hbar}{m i} \int \psi_k^*(r) \nabla \psi_k(r) d^3r$. Тогда сила Лоренца приобретает вид

$$F = e E + \frac{1}{c} [j_k \times H] \quad (4.37)$$

а элементарная формула Друде для проводимости I_9 переходит в $\sigma = \frac{1}{3} j_F^2 \tau N(E_F)$. Константа Холла тогда есть: $I_{9,54}$:

$$R = \frac{j_F \tau}{c p_F} \frac{1}{\sigma} = \frac{3}{c j_F p_F} N^{-1}(E_F) = \frac{e v_F}{j_F} \frac{1}{\pi e c} \quad (4.38)$$

что совпадает с (4.36). В последнем равенстве v_F определяется как градиент электронного спектра в p -пространстве, с тем, чтобы связать $N(E_F)$ с площадью и в конечном счете, с объемом Ферми поверхности $I_{9,54}$.

Если же сила Лоренца считается зависящей от групповой скорости V_k пакета $\psi_k(r)$, а не от тока, как это имеет место в теории Ферми-жидкости, то мы вынуждены добавить дополнительный фактор $\frac{e v_F}{j_F}$ в формуле (4.38), так что:

$$R \approx \frac{1}{g^2} R_0 \quad (4.40)$$

Какое из двух предположений (4.36) или (4.40) справедливо и вообще справедливо-ли хоть одно из них, в настоящее время совершенно неизвестно, что еще раз подчеркивает необходимость построения последовательной теории. Однозначные экспериментальные данные также пока отсутствуют.

Данные по т.э.д.с. ("п-р" аномалия) по-видимому можно пытаться объяснить в духе известной формулы :

$$\alpha = \left(\frac{\pi^2}{3}\right) \left(\frac{k}{e}\right) \left(\frac{kT}{E_F}\right) \left\{ \frac{d}{d\varepsilon} \ln \sigma(\varepsilon) \right\}_{\varepsilon=E_F} \quad (4.39)$$

следующей из элементарной кинетической теории, хотя не вполне ясно, может ли быть получена формула такого типа в теории "жидких полупроводников с учетом сильного рассеяния в области псевдощели. Если же принять формулу такого типа, то предположения о зависимости $\sigma(\varepsilon)$ могут, вероятно, объяснить аномальный знак т.э.д.с. 56,7,8 .

5. Роль межэлектронных корреляций

Выше мы всегда рассматривали фактически одноэлектронную задачу, хотя наличие случайного поля в известном смысле уже приводит к задаче, эквивалентной проблеме многих тел.

Между тем хорошо известно, что учет межэлектронного взаимодействия крайне существен в теории твердого тела и приводит к ряду качественно новых результатов (Ферми-жидкостные эффекты в теории металлов, переход металл-диэлектрик и т.п.). К сожалению, соответствующее рассмотрение в теории неупорядоченных систем в настоящее время практически отсутствует (кроме, может быть, случая сильно легированных полупроводников I,16). Объясняется это, прежде всего, чрезвычайной сложностью возникающих задач. Как мы видели выше, в неупорядоченных системах, как правило, теряет смысл само понятие электронных возбуждений квазичастиц, которое позволяет радикально упростить задачу многих тел в теории кристаллических металлов и полупроводников. Ниже мы ограничимся рядом замечаний сугубо качественного характера иллюстрирующим необходимость учета межэлектронных корреляций в теории неупорядоченных систем.

Локализация электронов в случайном поле представляет собой,

очевидно, частный случай перехода металл-диэлектрик (переход Андерсона). Хорошо известно, что межэлектронные корреляции могут привести к переходу металл-диэлектрик в отсутствие случайного поля (переход Мотта). Мы рассмотрим кратко простейший случай так называемой модели Хаббарда 57 (S-электроны). Гамильтониан этой модели имеет вид:

$$H = \sum_{j\sigma} E_{j\sigma} a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{ij\sigma} V_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{j\sigma} U_{j\sigma} n_{j\sigma} n_{j-\sigma} \quad (5.1)$$

где j - нумерует узлы решетки, σ - спиновая переменная, $n_{j\sigma} = a_{j\sigma}^+ a_{j\sigma}$ - оператор числа электронов на j -м узле. Таким образом, модель Хаббарда описывает металл (обычно считается, что в среднем мы имеем $n \ll 1$ электронов на узел решетки) в картине сильной связи с учетом сильного межэлектронного отталкивания на одном узле (третий член в (5.1)). При этом считается $E_{j\sigma} = E_{i\sigma}$; $U_{j\sigma} = U_{i\sigma} = U$, а $V_{ij} = V$ описывает переходы между ближайшими соседями. Как показал Хаббард, взаимодействие $\frac{1}{2} \sum_{j\sigma} U n_{j\sigma} n_{j-\sigma}$ приводит, вообще говоря, к расщеплению исходной зоны шириной $2ZV$, где Z - число ближайших соседей, на две, с шириной запрещенной зоны порядка U , то есть к переходу металл-диэлектрик. В результате довольно громоздкого рассмотрения выяснилось, что диэлектрическая щель впервые возникает при некотором критическом значении отношения $\frac{V}{U}$: 1,57

$$\left(\frac{V}{U}\right)_{crit} \approx 1,15 \quad (5.2)$$

Сходство модели Хаббарда с рассмотренной выше моделью Андерсона достаточно очевидно. Гамильтониан Андерсона (3.1) получается из (5.1) отбрасыванием Хаббардовского взаимодействия и введением случайных флуктуаций $E_{j\sigma}$ от узла к узлу. Однако Хаббардовские корреляции в известном смысле эквивалентны андерсоновскому случайному полю. В са-

мом деле, взаимодействие $\frac{1}{2} \sum_{j \neq c} U n_{jc} n_{jc}$ отлично от нуля только в случае, когда на одном узле оказываются одновременно два электрона с противоположными спинами. Рассматривая распространение "лишнего" электрона в такой системе, мы видим, что этот электрон, перескакивая с узла на узел (член V_{ij} в (5.1)) встречает на своем пути как занятые другими электронами узлы, так и свободные. Соответственно на него действует случайное (ввиду случайного распределения свободных и занятых узлов) поле с амплитудой U . Довольно ясно, что добавление такого "случайного поля" в модель Андерсона будет способствовать локализации электронов, так что отношение $\frac{U}{V}$ будет входить в условие локализации, эффективно уменьшая критическое отношение типа (3.15) модели Андерсона. Подробное рассмотрение модели Андерсона с учетом хаббардовских корреляций, подтверждающее этот вывод, проведено в работе 58. Вместе с тем совершенно не исследован вопрос о том, будет ли хаббардовское взаимодействие приводить в модели Андерсона к возникновению диэлектрической щели. Качественно кажется возможным по крайней мере возникновение соответствующей псевдощели. Мы приходим, таким образом, к выводу, что учет хаббардовских корреляций может привести к существенному усложнению и обогащению модели Андерсона. Отметим, что в модели Хаббарда проявляются интересные магнитные свойства 59,60, что, по-видимому, позволит получить существенные результаты и в отношении магнитных свойств аморфных полупроводников.

Что касается роли межэлектронных корреляций в модели жидкого полупроводника, основанной на приближении почти свободных электронов, то здесь какие-либо результаты отсутствуют, и в настоящее время неясно, приведет ли их учет к некоторому обобщению теории электронной Ферми-жидкости металлов или же здесь возникнут интересные эффек-

ты, связанные с возможным ослаблением экранировки кулоновского взаимодействия, вызываемым уменьшением плотности электронных состояний в области псевдощели. Отсутствие экранировки в обычных полупроводниках приводит, как известно, к различным экситонным эффектам. В то же время введение примесей сильно подавляет все явления, связанные с образованием экситонов. Скорее всего поэтому кулоновские эффекты в "жидких полупроводниках" не очень существенны.

x x
x

Настоящий обзор возник из доклада автора на семинаре по жидким металлам и полупроводникам в Академгородке Красная Пахра. Автор признателен организатору этого семинара В.А.Алексееву, а также всем его участникам, в особенности А.А.Андрееву, за интерес к данной работе.

Большая часть рассмотренных выше вопросов обсуждалась автором с Л.В.Келдышем, Е.Г.Максимовым, Д.И.Хомским и другими сотрудниками Теоретического отдела ФИАН. Всем им автор приносит свои глубокую благодарность.

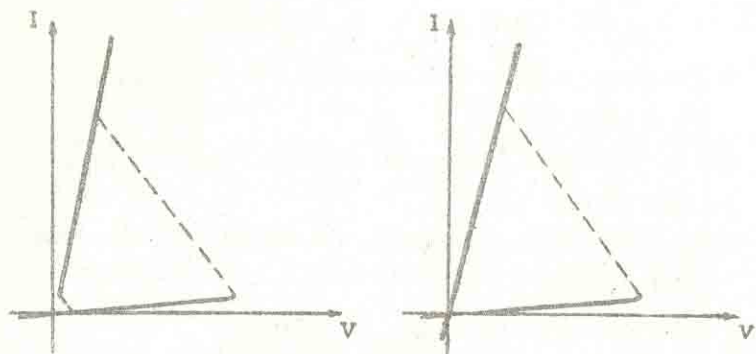
ЛИТЕРАТУРА:

1. N.F.Mott, E.A.Davis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford 1971.
- Н.Мотт. Электроны в неупорядоченных структурах. "Мир", 1969.
2. А.И.Губанов. Квантово-электронная теория аморфных проводников. Изд.АН СССР, 1968.
3. Н.Марч. Жидкие металлы. "Металлургия" 1972.
4. В.А.Алексеев, А.А.Андреев, В.Я.Прохоренко. УФН 106, 398 (1972).
5. D.Adler. CRC Critical Reviews in Solid State Sciences, October 1971.
6. T.Faber. An Introduction to the Theory of Liquid Metals. Cambridge 1972.
(см.также обзор этого же автора в книге "Физика металлов". Электроны. Под ред.Д.Займана. "Мир" 1972).
7. R.S.Allgaier. Phys.Rev. 185, 227 (1968); Phys.Rev.B2, 2257 (1970).
8. R.S.Allgaier. J. Vac. Sci. Technology 8, 113 (1971).
9. G.Busch, H.Guntherodt, H.Schwegler. Phys.Lett. 33, 64 (1970).
10. А.А.Андреев, В.А.Алексеев, Э.А.Лебедев, М.Мамадалиев, Б.Т.Мелех, А.Р.Регель, Ю.Ф.Рыжков. ФТП 6, 661 (1972).
11. H.K.Nelish. Sci. American 221, No.5, 30 (1969).
12. P.W.Anderson. Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
13. И.М.Лифшиц. УФН 88, 617 (1964).
14. В.Л.Бонч-Бруевич. В сб.Итоги науки. Физика твердого тела. Изд.ВИНИТИ, 1965.

15. M.H.Cohen. J.Non-Crystalline Solids 4, 391 (1970).
16. Б.И.Шилевский, А.Л.Вфрос. ЖЭТФ 62, 1156 (1972).
17. W.Warren. Phys. Rev. B3, 3708(1971); Phys.Rev. B6, 2522 (1972).
18. T.P.Eggarter. Phys. Rev. A5, 2496 (1972).
19. Д.Займан. Принципы теории твердого тела. "Мир" 1966.
20. У.Харрисон. Теория твердого тела. "Мир" 1972.
21. Ф.Зейтц. Современная теория твердого тела. ИЛ 1947.
22. D.Weaire, M.Thorpe. Phys. Rev. B4, 2508, 3518 (1971).
23. J.Klima, T.McGill, J.Ziman. Discuss. Faraday Soc. No.50 (1971).
24. T.McGill, J.Klima. Phys. Rev. B5, 1517 (1972).
25. J.Ziman. J.Phys. C4, 3129 (1971).
26. E.Keller. J.Phys. C4, 3143 (1971).
27. А.Ф.Иоффе, А.Р.Регель. Progr.Semiconductors 4, 237 (1960).
28. S.F.Edwards. Phil. Mag. 6, 617 (1961); Proc. ^{Roy. Soc.} A267, 518 (1962).
29. L.Ballentine. Can. J.Phys. 44, 2533 (1966).
30. R.Shaw, N.Smith. Phys. Rev. 178, 985 (1969).
31. М.В.Садовский. Препринт ФИАН № 68 (1978); Краткие сообщения по физике ФИАН № 7, 28 (1978).
32. J.Ziman. J.Phys. C2, 1704 (1969).
33. У.Харрисон. Псевдопотенциалы в теории металлов. "Мир" 1968.
34. У.Вронера. J.Non-Crystalline Solids 4, 428 (1970).
35. P.Lloyd. J.Phys. C2, 1717 (1969).

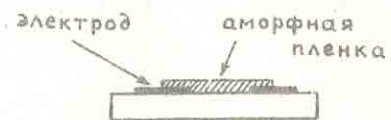
36. P.W.Anderson. Comments. Sol.State Phys.2, 193 (1970).
37. D.J.Thouless. J.Phys. 03, 1559 (1970).
38. E.N.Economou, M.H.Cohen. Phys. Rev. Lett. 25, 1445(1970);
Phys.Rev.B5, 2931(1972). Solid State Comm. 12,
1013 (1973).
39. С.Чандрасекар. Стохастические проблемы в физике и астрономии. ИЛ. 1947.
40. J.Ziman. J.Phys.02, 1230 (1969).
41. P.W.Anderson, R.Abou-Chakra, D.J.Thouless. J.Phys.06,
1734 (1973).
42. S.F.Edwards. J.Non-Crystalline Solids 4, 417 (1970).
43. S.F.Edwards, R.Abram. J.Phys. 05, 1183, 1196 (1972).
44. K.F.Freed. J.Phys. 04, L331(1971); Phys.Rev. B5,
4802 (1972).
45. K.F.Freed. Adv. Chem. Phys. Vol.22 (1972).
46. K.F.Freed, M.H.Cohen. Phys. Rev. B3,
3400 (1971).
47. N.F.Mott. Phil. Mag. 26, 1015 (1972).
48. J.Ziman. J.Phys. 01, 1532 (1968).
49. B.Lest, D.J.Thouless. Phys. Rev. Lett. 27,
1719 (1971).
50. S.Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. 27, 1722 (1971).

51. D.Adler, L.Flore, S.Senturia. Sol.State Comm. 6,
329 (1973).
52. V.Ambegaokar, B.Halperin, J.Langer. Phys. Rev.B4,
885 (1972).
53. А.А.Андреев, В.А.Алексеев, А.И.Манукян, Л.Н.Шумилова.
ФТТ 15, 382, (1973).
54. J.Ziman. Adv. Phys. 16, 551 (1968).
55. L.Friedman. J.Non-Crystalline Solids 6, 329 (1971).
56. J.Robinson. Phys. Rev. 161, 533 (1967).
57. J.Hubbard. Proc. Roy. Soc. A276, 238 (1963); A277,
237 (1964); A281, 401 (1964).
58. M.Kikuchi. J.Phys. Soc. Japan 33, 204 (1970).
59. B.Doniach. Adv. Phys. 18, 819 (1969).
60. Д.И.Хомский. ФММ 29, 81 (1970).



а)

б)



с)

Рис. 1

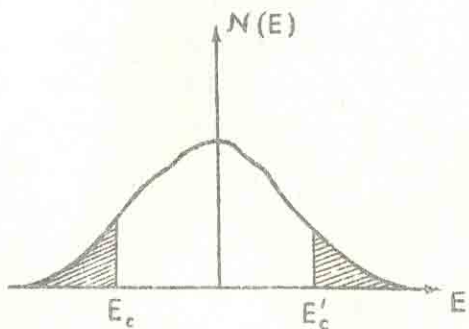
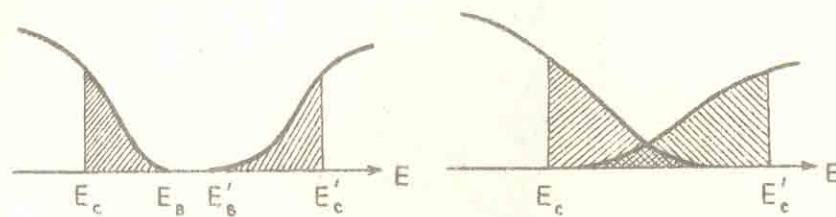


Рис. 2



а)

б)

Рис. 3

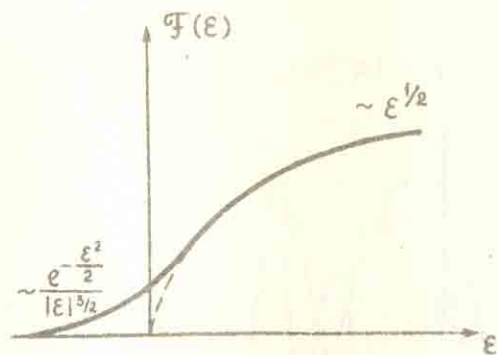


Рис. 4

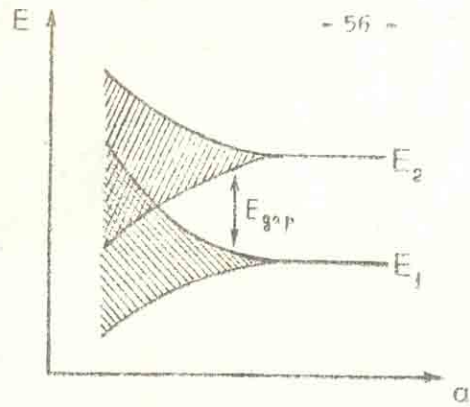


Рис. 5

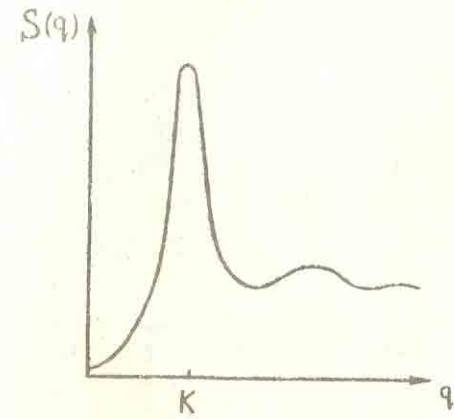


Рис. 7

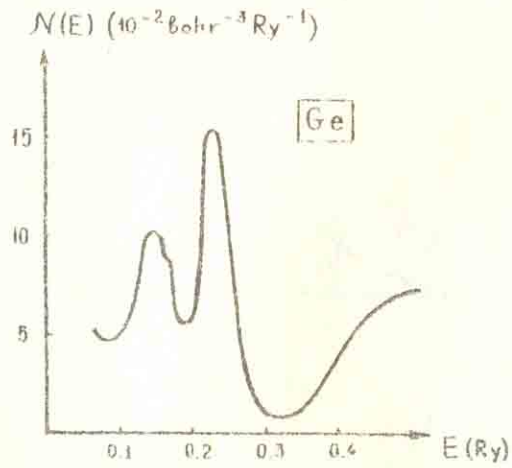


Рис. 6

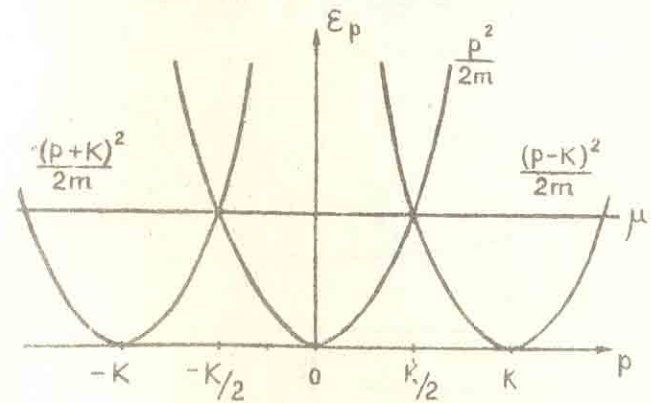


Рис. 8

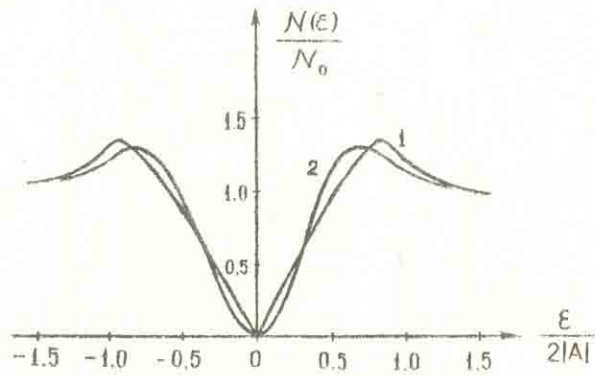


Рис. 9

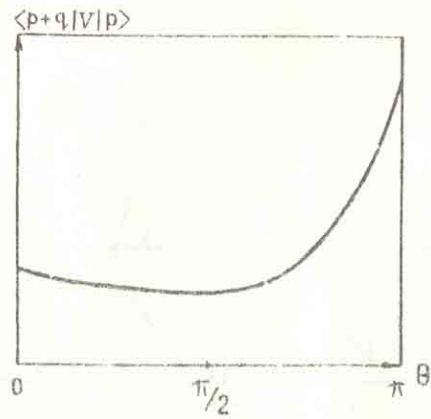


Рис. 10

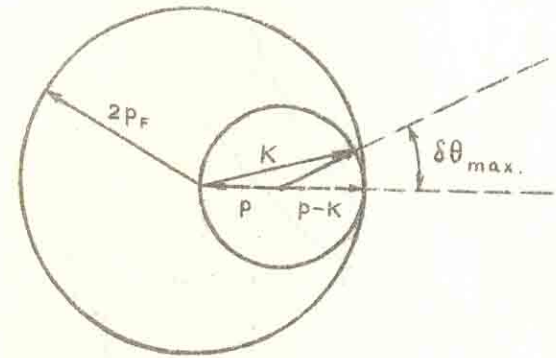


Рис. 11

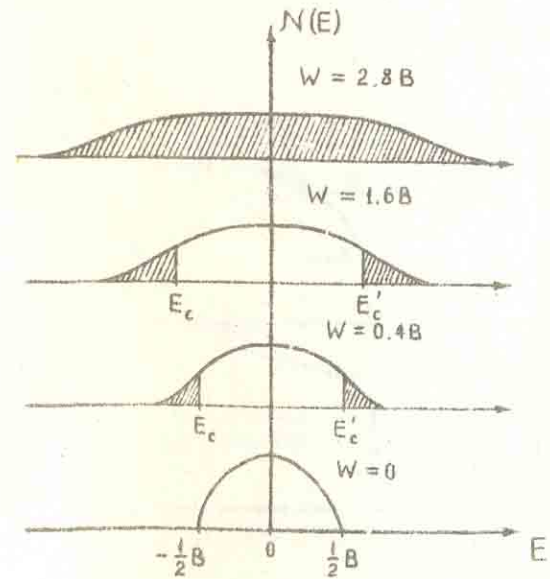


Рис. 12

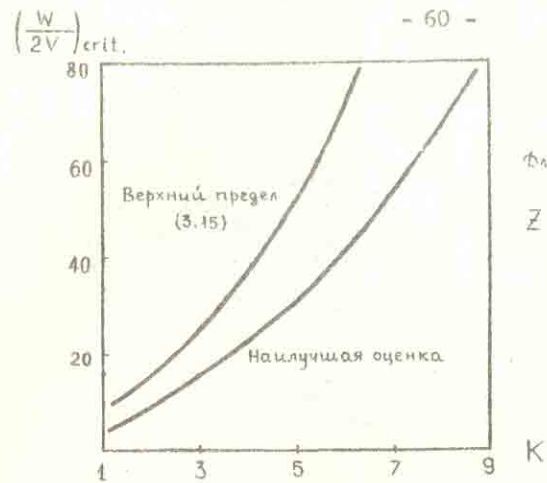


Рис. 13

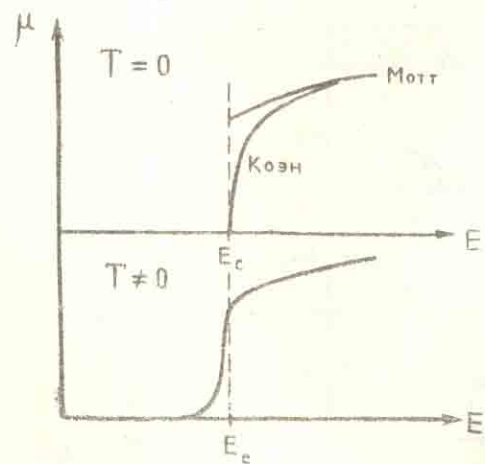


Рис. 14

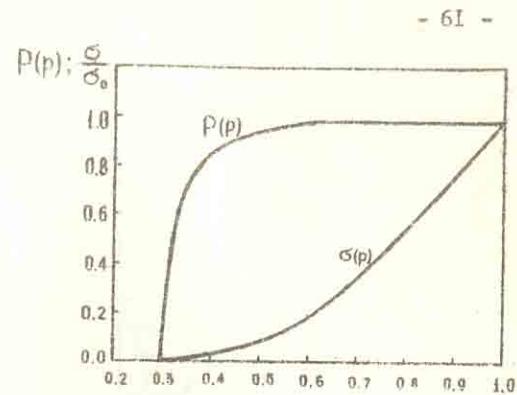


Рис. 15

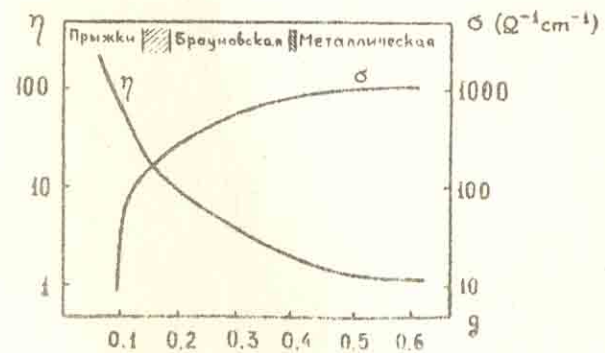


Рис. 16

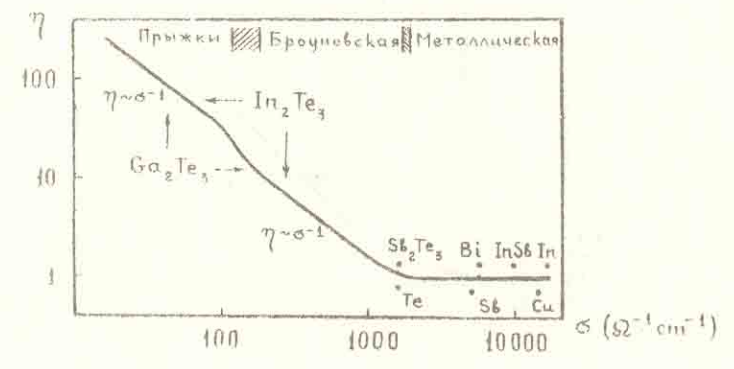


Рис. 17