

Правило Мооя и слабая локализация

В. Ф. Гантмахер

Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Россия

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 30 августа 2011 г.

После переработки 9 сентября 2011 г.

Показано, что учет эффекта слабой локализации может качественно объяснить наблюдаемую корреляцию между величиной удельного сопротивления ρ высокорезистивных металлических сплавов и знаком изменения их сопротивления с температурой: производная $d\rho/dT$ отрицательна у сплавов с удельным сопротивлением в интервале 300–150 мкОм·см, что соответствует длине свободного пробега электронов порядка межатомного расстояния, но положительна у сплавов с меньшим удельным сопротивлением (правило Мооя).

В этой статье речь пойдет о металлах и сплавах с большой концентрацией носителей n , не меньшей, чем один электрон на атом, $n \gtrsim a^{-3}$ (a – межатомное расстояние). В таких материалах никогда не наблюдается перехода Андерсона: при любом достижимом уровне беспорядка они остаются металлическими с удельным сопротивлением, меньшим некоторого критического значения $\rho^* \sim 300$ мкОм·см, приблизительно равного сопротивлению при длине свободного пробега электронов l порядка межатомного расстояния:

$$\rho^* = \frac{\hbar k_F}{ne^2 l} = \frac{\hbar}{e^2} \frac{1}{k_F}, \quad l \sim k_F^{-1} \sim a, \quad (1)$$

где $k_F \sim a^{-1}$ – фермиевский волновой вектор, а частота рассеяния электрона на статических дефектах \hbar/τ порядка энергии Ферми T_F (температура везде выражается в энергетических единицах).

Проблема отсутствия перехода Андерсона в металлических материалах с высокой электронной концентрацией имеет три экспериментальных аспекта: – измерение сопротивления этих материалов при низких температурах и росте беспорядка; – измерение температурной зависимости сопротивления высокорезистивных сплавов [1]; – измерение температурной зависимости сопротивления сплавов со сравнительно малым остаточным сопротивлением ρ_0 , но с очень большой константой электрон-фононного взаимодействия, т.е. с сопротивлением, быстро растущим с температурой [2].

Данная статья посвящена второму из трех перечисленных аспектов.

Будем характеризовать уровень беспорядка нормированной частотой рассеяния на статических дефектах α ,

$$\alpha = \frac{\hbar}{T_F} \tau^{-1}, \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (2)$$

Согласно принципу Иоффе–Регеля, больше единицы α быть не может. При $\alpha = 1$ классическое остаточное сопротивление $\rho_0 \approx \rho^*$. Значение $\alpha = 0$ означает идеальную бездефектную решетку, в которой $\rho_0 = 0$.

При $\alpha \ll 1$ рассеяния на беспорядке и на фононах обычно независимы и температурно зависящая часть сопротивления, называемая функцией Грюнайзена ($G(T)$), не зависит от беспорядка, так что полное сопротивление $\rho_{cl} = \rho_0 + G(T)$ (индекс “cl” указывает на то, что в сопротивлении не учтены интерференционные поправки, обусловленные волновой природой электрона). Для удобства сравнения с выражением (1) запишем $G(T)$ в виде $G(T) = (\hbar/e^2)[\alpha_{ph}(T)/k_F]$, так что

$$\rho_{cl} = \rho_0 + G(T) = \frac{\hbar}{e^2} \frac{1}{k_F} (\alpha + \alpha_{ph}). \quad (3)$$

При низких температурах, $T \rightarrow 0$, функция $\alpha_{ph}(T) \propto T^5$, а при $T \gtrsim T_D/3$ (T_D – температура Дебая) она выходит на асимптотику [3]

$$\alpha_{ph}(T) \rightarrow \gamma T/T_F, \quad (4)$$

где численный коэффициент γ зависит от свойств конкретного вещества. В области температур, где справедлива асимптотика (4), величина α_{ph} связана с частотой рассеяния электрона на фононах τ_{ph}^{-1} соотношением, аналогичным соотношению (2):

$$\alpha_{ph} = \frac{\hbar}{T_F} \tau_{ph}^{-1} = \gamma T/T_F. \quad (5)$$

Если воспользоваться буквенными оценками, в частности положить деформационный потенциал $D \simeq e^2/a$, а k_F приравнять величине вектора обратной решетки K , то получится, что коэффициент

$\gamma = 1$ [4]. В реальных металлах он бывает и меньше, и больше единицы. Условие $\gamma \gg 1$ означает сильную электрон-фононную связь.

Поскольку скорость теплового движения ионов много меньше скорости электронов v_F , электроны не различают статический беспорядок от дефектов решетки и динамический беспорядок, порожденный фононами. Чтобы классическое сопротивление (3) по-прежнему удовлетворяло принципу Иоффе–Регеля, необходимо потребовать, чтобы

$$\alpha + \alpha_{ph} \leq 1.$$

В высокорезистивных сплавах ($\alpha \gtrsim 0.3-0.4$) соотношение (3) нарушается в том смысле, что статическая и динамическая части сопротивления перестают быть независимыми. Часть сопротивления, зависящая от температуры, становится существенно меньше и даже может оказаться противоположного знака. Большой объем экспериментальных наблюдений был подытожен в работе Моойа [1], который сформулировал эмпирическое правило. Знак производной удельного сопротивления $d\rho/dT$ высокорезистивных сплавов коррелирует с величиной сопротивления: $d\rho/dT > 0$ в металлических сплавах с сопротивлением меньше 100–150 мкОм·см, но $d\rho/dT < 0$ в сплавах с большим сопротивлением:

$$\begin{aligned} d\rho/dT > 0 & \text{ при } \rho < 100-150 \text{ мкОм} \cdot \text{см}, \\ d\rho/dT < 0 & \text{ при } \rho > 100-150 \text{ мкОм} \cdot \text{см} \end{aligned} \quad (6)$$

(см. также [5], гл. 1). Речь идет о сравнительно высоких температурах, от 20–30 К до комнатных, и даже выше.

Первая попытка теоретически объяснить правило Моойа была сделана в работе [6] с использованием рассуждений в рамках скейлинговой теории [7] квантового перехода металл–изолятор. Проблема, однако, в том, что в этих системах перехода как раз и не наблюдается, поэтому предположение о том, что мы находимся в его окрестности, не очень убедительно. Более интересным кажется замечание в книге [8] (см. п. 2.5.3) о том, что правило Моойа может быть связано со слабой локализацией, которая приводит к отрицательному температурному коэффициенту сопротивления. В развитие этого замечания в настоящей работе исследуются возможности объяснения эмпирической закономерности (6) путем учета эффекта слабой локализации в простой модели.

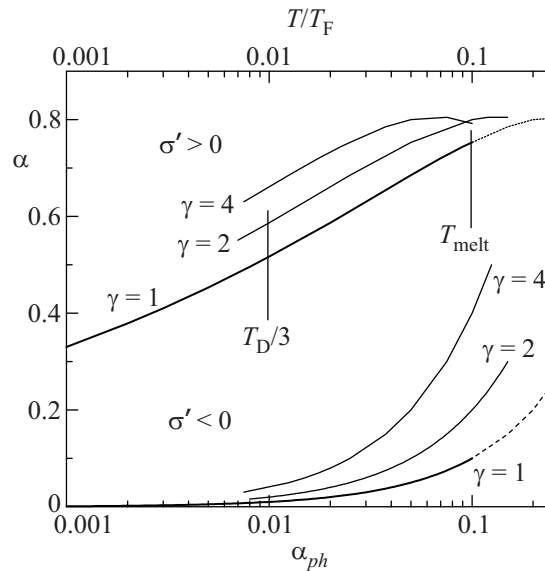
Положим для определенности, что температура плавления металлического сплава T_{melt} и температура Дебая T_D удовлетворяют соотношениям

$$T_{\text{melt}} \simeq T_F/10, \quad T_D \simeq T_{\text{melt}}/3, \quad (7)$$

а константа $\gamma = 1$. С учетом асимптотики (4) это означает, что в области

$$0.01 \leq \alpha_{ph} \leq 0.1, \quad (8)$$

представляющей основной интерес на плоскости (α_{ph}, α) , имеет место пропорциональность $\alpha_{ph} \propto T$. На рисунке интервал (8) отмечен двумя вертикаль-



Линии, вдоль которых при разных γ равны частоты статического (τ^{-1}) и динамического (τ_{ph}^{-1}) рассеяния ($\tau^{-1} = \tau_{ph}^{-1}$, три нижние кривые) и вдоль которых равны нулю производные проводимости по температуре ($\partial\sigma/\partial T = 0$, три верхние кривые)

ными линиями. Чтобы растянуть этот интервал, масштаб по оси α_{ph} сделан логарифмическим.

В области над нижней кривой, $\alpha = \alpha_{ph}$ ($\gamma = 1$), рассеяние на статических дефектах происходит чаще, чем на фононах. В частности, для высокорезистивных сплавов ($\alpha > 0.3$) в области температур $T/T_F < 0.1-0.2$ можно считать справедливым неравенство

$$\alpha \gg \alpha_{ph}. \quad (9)$$

Поэтому в данной области должна иметь место дифракция электронной волны на случайном потенциальном поле примесей, которая в случае большой частоты статического рассеяния τ^{-1} реализуется вплоть до высоких температур. При $\alpha \ll 1$, когда электронная волновая функция представляет собой длинный волновой пучок, а при вычислениях можно ограничиться первым приближением теории возмущений, результатом дифракции является эффект слабой локализации [9, 10, 11]. Эффект заключается в появлении

квантовой поправки $\delta\sigma$ к проводимости, выраженной через диффузионную длину L_φ , обусловленную рассеянием на фононах,

$$\delta\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{L_\varphi} = \frac{e^2}{\hbar} k_F (\alpha\alpha_{ph})^{1/2}, \quad L_\varphi = l\sqrt{\tau_{ph}/\tau}. \quad (10)$$

Строго говоря, в интересующей нас области $\alpha \sim 1$ ограничиться первым приближением и пользоваться формулами слабой локализации (10) нельзя. Однако очень поучительно проследить, как меняется относительный вклад этого первого приближения при увеличении α .

Добавив к классическому выражению для проводимости трехмерной среды, $\sigma_{cl} = 1/\rho_{cl}$, выражение для квантовой поправки (10), получим

$$\sigma = \sigma_{cl} + \delta\sigma = \frac{e^2}{\hbar} k_F \left[\frac{1}{\alpha + \alpha_{ph}} + (\alpha\alpha_{ph})^{1/2} \right]. \quad (11)$$

В выражении (11) для проводимости монотонно растущая с температурой величина α_{ph} в первом из двух слагаемых входит в знаменатель, а во втором – в числитель. Приравняв нулю производную $\partial\sigma/\partial\alpha_{ph}$, получим уравнение

$$\alpha + \alpha_{ph} = \sqrt{2}(\alpha/\alpha_{ph})^{1/4} \quad (12)$$

линии, вдоль которой эта производная меняет знак (верхняя линия $\gamma = 1$ на рисунке).

Предположение $\gamma = 1$ означает, что при рассмотрении соответствующих кривых на рисунке можно пользоваться не только нижней шкалой α_{ph} , но и верхней шкалой T/T_F . При $\gamma \neq 1$ нужно пользоваться верхней шкалой, а обе кривые сдвинуть в горизонтальном направлении на $\lg \gamma$. Режим слабой локализации реализуется над соответствующей нижней кривой, а над соответствующей верхней кривой производная проводимости по температуре $\sigma' > 0$, т.е. $\partial\rho/\partial T$ отрицательна.

Из полученного набора кривых видно, что независимо от величины γ при $\alpha > 0.8$ производная проводимости по температуре всегда положительна, $\sigma' > 0$, т.е. вклад слабой локализации доминирует, а при $\alpha < 0.5$ производная отрицательна, по крайней мере в интервале температур (8). Это и составляет содержание правила Моойа.

При написании выражений для диффузионной длины L_φ и квантовой поправки (10) предполагалось, что время τ_φ потери фазовой когерентности в электронной системе определяется рассеянием электронов на фононах, $\tau_\varphi = \tau_{ph}$. Вообще говоря, потеря когерентности могла бы происходить и из-за межэлектронных столкновений. Однако в диффузионном

режиме (9) частота электрон-электронных столкновений τ_{ee} в трехмерной системе определяется выражением ([11]; см. также [5], § 2.4)

$$\hbar/\tau_{ee} \sim T^{3/2} T_F^{-2} (\hbar/\tau)^{3/2}, \quad (13)$$

которое при сильном беспорядке ($\alpha \approx 1$) превращается в выражение

$$\hbar/\tau_{ee} \sim T(T/T_F)^{1/2} \ll \hbar/\tau_{ph}. \quad (14)$$

Квантовая поправка к проводимости возникает также и из-за электрон-электронного взаимодействия [11]. Учет электрон-электронного рассеяния и соответствующей поправки Аронова–Альтшулера может только сдвинуть границу $\alpha = 0.8$ вниз. Согласно неравенству (14), непосредственным вкладом частоты электрон-электронных столкновений τ_{ee}^{-1} в классическое сопротивление (3) и в классическую проводимость в интересующем нас температурном интервале (8) можно пренебречь. Согласно оценкам [3], квантовая поправка Аронова–Альтшулера в трехмерных системах больше поправки от слабой локализации, и именно она часто наблюдается в высокорезистивных сплавах [12, 13]. Это должно усиливать часть выражения (11) с положительной производной.

Таким образом, экспериментальные температурные зависимости сопротивления высокорезистивных сплавов удастся описать, используя квантовые поправки, полученные в первом приближении теории возмущений. Возможно, это означает, что вклад более высоких порядков по каким-то причинам мал, что согласуется с другим экспериментальным фактом: отсутствием в этих сплавах перехода от слабой локализации к сильной (перехода Андерсона). Локализация остается слабой, но, благодаря очень малой длине упругого пробега $l \sim k_F^{-1}$, сохраняется вплоть до высоких температур, приводя к правилу Моойа.

Автор благодарен Ю.М. Гальперину, А.С. Иоселевичу и В.П. Минееву за ценные замечания. Работа выполнена в рамках проекта РФФИ # 11-02-12071.

1. J. H. Mooij, Phys. Stat. Sol. (a) **17**, 521 (1973).
2. Z. Fisk and G. W. Webb, Phys. Rev. Lett. **36**, 1084 (1976).
3. А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*, М.: Наука, 1987 [A. A. Abrikosov, *Fundamentals of the Theory of Metals*, North-Holland, 1988].
4. В. Ф. Гантмахер, И. Б. Левинсон, *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках*, М.: Наука, 1984 [V. F. Gantmakher and Y. B. Levinson, *Carrier scattering in metals and semiconductors*, North-Holland, 1987].

5. В. Ф. Гантмахер, *Электроны в неупорядоченных средах*, М.: Физматлит, 2005 [V. F. Gantmakher, *Electrons and Disorder in Solids*, Oxford University Press, 2005].
6. Y. Imry, Phys. Rev. Lett. **44**, 469 (1980).
7. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. W. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
8. Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford University Press, 2002 [Й. Имри, *Введение в мезоскопическую физику*, М.: Физматлит, 2002].
9. Л. П. Горьков, А. И. Ларкин, Д. Е. Хмельницкий, Письма в ЖЭТФ **30**, 248 (1979).
10. G. Bergmann, Phys. Rep. **107**, 1 (1984).
11. B. I. Altshuler and A. G. Aronov, In: *Electron-electron Interactions in Disordered Systems* (eds. A. L. Efros and M. Pollak), North-Holland, 1985.
12. J. J. Lin and C. Y. Wu, Phys. Rev. B **48**, 5021 (1993).
13. L. Li, S. T. Lin, C. Dong, and J. J. Lin, Phys. Rev. B **74**, 172201 (2006).