

Из соотношений (1), (2) следует, что волноводы с одинаковым значением параметра  $L/d$  идентичны с точки зрения величины коэффициента пропускания, так как при одновременном и равном увеличении или уменьшении длины и ширины канала ЛВ числа отражений не меняются.

Результаты данной работы показывают перспективность использования лентообразных волноводов для повышения возможностей метода рентгеновской рефлектометрии, поскольку коэффициент пропускания рентгеновода более чувствителен к степени шероховатости поверхности, чем кривые однократного ПВО.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Андреева М. А., Борисова С. Ф., Степанов С. А. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1985. № 4. С. 5. [2] Андреев А. В. // УФН. 1985. 145. № 1. С. 113. [3] Аркадьев В. А., Коломийцев А. И., Кумахов М. А. и др. // УФН. 1989. 157. № 3. С. 529. [4] Смирнов Л. А., Сотникова Т. Д., Анохин Б. С., Тайбин Б. З. // Опт. и спектр. 1979. 46. № 3. С. 593. [5] Смирнов Л. А., Анохин С. Б. // Там же. 1980. 48. № 3. С. 574. [6] Глебов В. И., Денисов Э. И., Жеваго Н. К. и др. // ЖТФ. 1985. 55. № 9. С. 1785. [7] Виноградов А. В., Зорев И. Н., Кожевников И. В., Якушкин И. Г. // ЖЭТФ. 1985. 89. № 6. С. 2124. [8] Петрашень П. В., Ковьев Э. К., Чуховский Ф. Н., Дегтярев Ю. Л. // ФТТ. 1983. № 4. С. 1211. [9] Галонов С. В., Генкин В. М., Салашенко Н. Н., Фраерман А. А. // ЖТФ. 1986. 56. № 4. С. 708. [10] Бондаренко И. В., Елисеенко Л. Г., Романова Л. С. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1989. № 6. С. 55. [11] Губарев М. В., Кованцев В. Е., Коломийцев А. И. и др. // Там же. 1989. № 12. С. 164. [12] Мингазин Т. А., Зеленев В. И., Лейкин В. Н. // ИТЭ. 1981. № 1. С. 229. [13] Саркисов С. Р., Саркисов Э. Р. // Тр. IV Всесоюз. совещ. по когерентному взаимодействию излучения с веществом. М., 1988. С. 228. [14] Саркисов С. Р., Саркисов Э. Р. // ПТЭ. 1989. № 6. С. 145. [15] Басс Ф. Г., Фукс И. М. Рассеяние волн на статистически неровной поверхности. М., 1972.

Поступила в редакцию  
11.02.91

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 5

УДК 537.312

### ПЕРЕХОД МОТТА И ЭЛЕКТРОННОЕ СПАРИВАНИЕ В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

В. Д. Блажин

(кафедра магнетизма)

Показана принципиальная возможность индуцировать переход Мотта металл—изолятор в узкозонных кристаллах сильным постоянным или переменным электрическим полем. В двухэлектронном приближении рассмотрена задача о формировании электронной пары малого радиуса в постоянном электрическом поле в таких веществах и сформулирована идея электромагнитной накачки, подобно лазерной, сверхпроводящих конденсаторов.

Известно, что увеличение межатомных расстояний в кристалле приводит к сужению его энергетических зон. В частном случае наполовину заполненной зоны проводимости последнее обстоятельство обуславливает антиферромагнитное превращение и переход Мотта металл—изолятор [1]. Такова ситуация, например, в органических полупроводниках на основе солей TCNQ, в которых узкая одномерная зона проводимости ширины  $\Delta=0,08$  эВ при энергии кулоновского взаимодействия двух электронов на узле  $U=0,17$  эВ отделена от ближайшей

незаполненной зоны щелью  $E_g=2$  эВ (NMP TCNQ [2]). Возможность управлять шириной зоны практически ограничена давлением. В настоящей работе мы хотим указать на принципиально иную возможность управлять шириной зоны, а следовательно, упомянутыми выше превращениями, используя сильное световое (или СВЧ) или постоянное электрическое поле. Далее, используя предложенный принцип, мы обсудим возможность формирования электронной пары малого радиуса в постоянном электрическом поле.

В общем случае влияние сильного электрического поля на кристалл является сложным. Оно изменяет волновые функции атомных электронов, из которых формируются волновые функции зоны, и потенциальные барьеры между атомами, изменяя тем самым интегралы перекрытия. Однако в кристаллах с узкой зоной проводимости и широкой запрещенной зоной в области относительно низких в сравнении с кристаллическими полями,  $e\mathcal{E}d/E_g \ll 1$ , и частот,  $\omega \ll E_g/\hbar$ , действие поля на зону целиком связано со сдвигом атомных уровней соседних узлов на величину  $e\mathcal{E}d$ , т. е. с образованием «штарковской лестницы». Здесь  $d$  — постоянная решетки. Возникновение «штарковской лестницы» приводит к тому, что кинетическая энергия электрона в периодической атомной цепочке в поле  $\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}} \cos \omega t + \vec{\mathcal{E}}_0$  становится зависящей от времени и имеет в приближении сильной связи вид

$$E_k = \frac{\Delta}{2} \cos \left( kd + \frac{e\vec{\mathcal{E}}d}{\hbar\omega} \sin \omega t + \frac{e\vec{\mathcal{E}}_0 d}{\hbar} t \right) = \\ = \frac{\Delta}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n \left( \frac{e\vec{\mathcal{E}}d}{\hbar\omega} \right) \cos \left( kd + n\omega t + \frac{e\vec{\mathcal{E}}_0 d}{\hbar} t \right), \quad (1)$$

где  $J_n(z)$  — функции Бесселя целого индекса,  $\hbar k$  — импульс электрона. Соответствующая волновая функция получается из волновой функции в отсутствие поля путем замены импульса  $\hbar k$  на  $\hbar p = \hbar k + \frac{e\vec{\mathcal{E}}}{\omega} \sin \omega t + e\vec{\mathcal{E}}_0 t$ . Скалярное произведение  $\vec{\mathcal{E}}d$  в формуле (1) и ниже учитывает ориентацию поля относительно оси цепочки.

Обобщение формулы (1) на случай трехмерного кристалла в приближении сильной связи осуществляется заменой проекций  $k$  на кристаллографические оси на соответствующие проекции  $p$  в выражении для энергии электрона в отсутствие поля (см., напр., [3]): это не меняет последующих выводов и оценок.

В случае, когда частота осциллирующей энергии  $E_k$  больше характерных частот столкновений  $\omega_{col}$ ,  $\omega \gg \omega_{col}$  или  $e\vec{\mathcal{E}}_0 d/\hbar \gg \omega_{col}$ , т. е. поле квантовое, состояние кристалла будет определяться средним значением  $\bar{E}_k$  — квазиэнергией, которая при этом становится интегралом движения [4]. В отсутствие постоянного поля для кристалла, помещенного в световое поле, имеем

$$\bar{E}_k = \frac{\Delta}{2} J_0 \left( \frac{e\vec{\mathcal{E}}d}{\hbar\omega} \right) \cos kd. \quad (2)$$

Как следует из (2), эффективная ширина зоны  $\tilde{\Delta} = \Delta_0 J_0 (e\vec{\mathcal{E}}d/\hbar\omega)$  спадает с ростом поля, обращаясь первый раз в нуль при  $e\mathcal{E} = 2,4 \hbar\omega/d$ . Таким образом, в достаточно сильных световых полях ( $\hbar\omega \sim 0,1$  эВ,  $d \sim 5$  А,  $\mathcal{E} \sim 10^6$  В/см) кристалл должен пройти через состояние изолятора — «светоизолятора» — даже без учета взаимодействия электронов, в одноэлектронном приближении, из-за неограниченного «утяжеления» свободных носителей. На самом деле учет кулоновского отталкивания электронов приведет к тому, что это состояние не будет реализоваться в многочастичной задаче, так как ранее наступит моттовский переход металл—изолятор (либо сформируется вигнеровский кристалл, в зависимости от концентрации электронов) в более слабых световых полях, определяемых из условий  $\tilde{U} > |\tilde{\Delta}|$  или  $U > |\tilde{\Delta}|$  при  $\Delta < \omega$ ,  $\Delta < e\mathcal{E}_0 d$ . Здесь  $\tilde{U}$  — перенормированное полем кулоновское взаимодействие [1]. При возрастании амплитуды светового поля ниспадающие осцилляции ширины зоны проводимости

$$\tilde{\Delta} \sim \Delta \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos\left(z - \frac{\pi}{4}\right), \quad z = \frac{e\vec{\mathcal{E}}d}{\hbar\omega} \rightarrow \infty$$

могут привести к конечному числу переходов Мотта — чередованию проводящей и непроводящей фаз, если энергия кулоновского взаимодействия  $U$  окажется меньше нескольких максимумов  $|\tilde{\Delta}|_{\max}$ , определяемых выражением (2).

В постоянном электрическом поле электрон осциллирует в  $k$ -пространстве. Как видно из (1), энергия электрона также осциллирует во времени с частотой  $e\vec{\mathcal{E}}_0 d/\hbar$  и имеет среднее значение  $E_k = 0$ . Таким образом, в постоянном поле должна иметь место моттовская локализация электронов на узлах решетки, поскольку выполнено условие  $e\vec{\mathcal{E}}_0 d/\hbar \gg \omega_{\text{cot}}$ .

Приведенные выше результаты получаются более строго, если использовать гамильтониан Хаббарда, учитывающий существование «штарковской лестницы» [5]:

$$H = H_0 + H_{\Delta},$$

$$H_0 = \sum_{j,\sigma} e\vec{\mathcal{E}}(t) R_j a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma} + U \sum_j a_{j\uparrow}^{\dagger} a_{j\uparrow} a_{j\downarrow}^{\dagger} a_{j\downarrow}, \quad (3)$$

$$H_{\Delta} = \frac{\Delta}{4} \sum_{j,\sigma} (a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{j-1,\sigma} + a_{j-1,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma}).$$

Исключая из (3) «полевые» члены с помощью унитарного преобразования

$$S_1 = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int \sum_{j,\sigma} e\vec{\mathcal{E}}(t) R_j a_{j,\sigma}^{\dagger} a_{j,\sigma} dt\right\},$$

$$\tilde{H} = S_1^{-1} \left( H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) S_1 =$$

$$= \frac{\Delta}{4} \sum_{j,\sigma,n} J_n \left( \frac{e\vec{\mathcal{E}}_0 d}{\hbar\omega} \right) \left[ \exp \left\{ i \left( n\omega t + \frac{e\vec{\mathcal{E}}_0 d}{\hbar} t \right) \right\} a_{j,\sigma}^+ a_{j-1,\sigma} + \text{э. с.} \right] + \quad (4)$$

$$+ U \sum_I a_{I1}^+ a_{I1} a_{I2}^+ a_{I2}$$

и ограничиваясь неосциллирующими во времени членами, приходим к обычному виду гамильтониана Хаббарда с перенормированным интегралом перекрытия, откуда непосредственно следуют сделанные выше утверждения. Отброшенные члены в (4) отвечают за процессы внутризонного поглощения света, которые можно не учитывать при  $\hbar\omega$  (или  $e\vec{\mathcal{E}}_0 d$ ), больших ширины эффективной зоны  $|\tilde{\Delta}|$ , или  $\tilde{\Delta} < \hbar\omega - \hbar\omega_q$  для процессов внутризонного поглощения с участием фона частоты  $\omega_q$ .

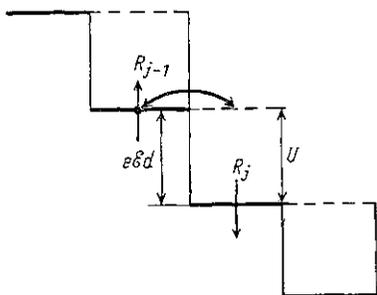
В отличие от параболической зоны, где вследствие равенства масс электронов электромагнитное поле не влияет на относительное движение последних, в нашем случае существенно непараболической зоны электроны в поле колеблются один относительно другого, что приводит также к перенормировке кулоновского взаимодействия и возникновению тормозных многофотонных процессов — внутризонному поглощению света. Можно показать, однако, исключив осциллирующие члены в (4) (обозначим их суммой буквой  $A(t)$ ) с помощью преобразования  $S_3 = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int A(t) dt \right\}$ , что перенормировкой, равно как и внутризонным поглощением, можно пренебречь, если  $\Delta < \hbar\omega$  или  $\Delta < e\vec{\mathcal{E}}_0 d$ . Соответствующие малые параметры в экспоненте  $S_3$  имеют вид  $\frac{\Delta}{4} \times$

$$\times \frac{J_n(z)}{n\hbar\omega} \text{ или } \frac{\Delta}{4e\vec{\mathcal{E}}_0 d}.$$

Квазиэнергетическое описание применимо и в области более низких частот и полей, если выполняются условия  $\omega_{col} \ll \omega$ ,  $\omega_{col} \ll e\vec{\mathcal{E}}_0 d$ . Однако при этом необходимо учитывать перенормировку кулоновского взаимодействия и внутризонное поглощение, если только последнее не запрещено законом сохранения энергии.

Заметим также, что в трехмерном случае, если проекции вектора внешнего поля на базисные векторы кристаллографической решетки существенно отличаются, оно будет приводить к анизотропной деформации зоны, что может вызвать обращение в нуль проводимости в определенном кристаллографическом направлении или кристаллографической плоскости. Таким образом, меняя ориентацию поля, можно переходить от трехмерной к одномерной или двумерной системе.

В приведенном выше анализе мы учитывали влияние поля в одноэлектронном приближении. Как видно из картины двойной «штарковской лестницы» (рисунок), в двухэлектронной задаче, когда кулоновское отталкивание, препятствующее перемещению электрона на соседний занятый узел решетки, точно скомпенсировано электрическим полем,  $e\vec{\mathcal{E}}_0 d = U$  (или световым квантом,  $\hbar\omega = U$ , как в [5]), система из двух соседних электронов становится неустойчи-



вой к образованию пары. При этих условиях возникает резонансное движение электрона между занятым и свободным узлом, и, как следствие, понижение энергии пары, известное как резонансное, или конфигурационное взаимодействие.

Энергия связи пары  $E$  определяется из уравнения

$$\begin{vmatrix} E & \frac{\Delta}{4} & \frac{\Delta}{4} \\ \frac{\Delta}{4} & E & 0 \\ \frac{\Delta}{4} & 0 & E \end{vmatrix} = 0, \quad (5)$$

$$E = -\frac{\Delta}{2\sqrt{2}}.$$

Величина  $\Delta/4$  равна интегралу перекрытия.

Нам представляется, что в случае зоны, заполненной наполовину (без учета фононов), моттовский изолятор в полях  $e\vec{E}_0\mathbf{d}=U$  должен быть также изолятором, все узлы решетки которого, однако, заполнены молекулами из двух атомов с обобщественными электронами. В отличие от изолятора Мотта кристалл при этом должен проявлять диамагнитные свойства.

С точки зрения поиска сверхпроводимости на основе рассмотренного выше механизма спаривания желательнее иметь свободно перемещающиеся по кристаллу пары, избежать локализации и накопления их на границе кристалла. Поэтому далее мы рассмотрим условия возникновения пары в кольце, в котором создается постоянное вихревое электрическое поле путем помещения кольца в равномерно нарастающее (или убывающее) магнитное поле  $H(t)=H_1 t/\tau$  (как в бетатроне). В случае соленоида радиуса  $a$ , расположенного вдоль оси кольца радиуса  $r$ , магнитное и электрическое поля связаны простым соотношением  $|\vec{E}_0| = \frac{1}{2c\tau} H_1 \frac{a^2}{r}$ , где  $c$  — скорость света [6].

Электроны в таком кристаллическом кольце описываются гамильтонианом (3). Вычислим энергию пары, свободно перемещающейся по кристаллу, воспользовавшись пробной волновой функцией вида  $|k\rangle = Q_k|0\rangle$ , где

$$Q_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j Q_{j,k} \exp\{ikR_j\}, \quad (6)$$

$$Q_{j,k}^{\pm} = u_k a_{j\uparrow}^{\pm} a_{j\downarrow}^{\pm} + w_k a_{j-1\uparrow}^{\pm} a_{j-1\downarrow}^{\pm} + v_k (a_{j\uparrow}^{\pm} a_{j-1\downarrow}^{\pm} + a_{j-1\uparrow}^{\pm} a_{j\downarrow}^{\pm}).$$

Выражение для энергии пары имеет вид

$$\begin{aligned} E_k = \langle k | \tilde{H} | k \rangle = \Delta v_k \left\{ u_k \left[ \cos \left( \frac{e\vec{E}_0\mathbf{d}}{\hbar} t + \frac{U}{\hbar} t \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \cos \left( kd + \frac{e\vec{E}_0\mathbf{d}}{\hbar} t - \frac{U}{\hbar} t \right) \right] + w_k \left[ \cos \left( \frac{e\vec{E}_0\mathbf{d}}{\hbar} t - \frac{U}{\hbar} t \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \cos \left( kd + \frac{e\vec{E}_0\mathbf{d}}{\hbar} t + \frac{U}{\hbar} t \right) \right] \right\}. \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь  $\tilde{H} = S_2^{-1} \left( H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) S_2$ ,  $S_2 = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int H_0 dt \right\}$ . Коэффициенты  $u_k$ ,  $v_k$ ,  $w_k$  определяются из условия минимума средней энергии  $\bar{E}_k$  для резонанса  $e\vec{\mathcal{E}}_0 \mathbf{d} = U$ :

$$E_k = \Delta v_k u_k \left[ 1 + \cos \left( kd - \frac{2e\vec{\mathcal{E}}_0 \mathbf{d}}{\hbar} t \right) \right], \quad (8)$$

нормировки волновой функции:

$$\langle k | k \rangle = 1 = u_k^2 + w_k^2 + 2u_k w_k \cos kd + 2v_k^2 \quad (9)$$

и дополнительного условия  $w_k = 0$ , которое учтено в (8). Последнее условие означает, что мы пренебрегаем вкладом в энергию от нерезонансной конфигурации — два электрона на узле  $j-1$  (см. рисунок). Условие нормировки (9) одновременно обеспечивает бозонные коммутационные соотношения для операторов пар  $Q_k$ ,  $Q_k^+$  в пределе малых плотностей электронов, когда ферми-структурой пар можно пренебречь, как в случае экситонов.

Получающиеся выражения для  $u_k$ ,  $v_k$  не зависят от импульса и равны  $v_k = -1/2$ ,  $u_k = 1/\sqrt{2}$ , и соответственно средняя энергия

$$\bar{E} = \frac{\Delta}{2\sqrt{2}}. \quad (10)$$

В выражении (10), в отличие от ситуации в резонансном световом поле,  $\hbar\omega = U$  [5], отсутствует вклад от кинетической энергии движения пары как целого вследствие ее осцилляторного во времени характера (8). Такой вклад  $\Delta v_k w_k \cos kd$  появляется, если учитывать конечность  $w_k$ .

Так как средняя энергия двух несвязанных электронов, как показано в начале настоящей работы, в сильном постоянном поле равна нулю, то из вышеизложенного следует, что в рассматриваемом случае в кольце должна формироваться свободная пара малого радиуса с энергией связи, определяемой выражением (10).

Зарегистрировать появление пар малого радиуса в сильных полях можно по изменению магнитных свойств узкозонных кристаллов. Однако также, на наш взгляд, рассмотренный способ генерации электронных пар представляет интерес с точки зрения возможности использовать его для создания (накачки) метастабильных сверхпроводящих конденсатов из пар малого радиуса, существование которых предполагалось, например, в затвердевших металл-аммиачных растворах [7]. Возможно, в экспериментах Огга [7] такая накачка осуществлялась в процессе ударного охлаждения или при переключении магнитного поля. В любом случае нам представляется целесообразным попытаться индуцировать сверхпроводимость в этих объектах, используя для накачки пар импульсы электрического или магнитного поля (или оптическую накачку, как в [5]). Поля, необходимые для формирования пар при  $U \sim 0,1$  эВ, постоянной решетки  $d \sim 5$  Å, составляют  $\mathcal{E} \sim 10^6$  В/см.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Мотт Н. Ф. Переходы металл—изолятор. М., 1979. [2] Epstein A. J., Etemad S., Garito A. F., Heeger A. J. // Phys. Rev. 1972. 5] N 3. P. 952. [3] Займан Дж. Электроны и фононы. М., 1962. С. 85, 108. [4] Зельдович Я. Б. // УФН.

УДК 548:537.621

### ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЕ И ЭФФЕКТ ХОЛЛА АМОРФНЫХ СПЛАВОВ $Cu_{1-x}Zr_x$ В $s-d$ -МОДЕЛИ (ПРИБЛИЖЕНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ЛОКАТОРА)

А. В. Ведяев, А. Б. Грановский, И. Х. Халилов, С. А. Ниналалов,  
Д. Х. Имамназаров, М. М. Гехтман (мл.)

(кафедра магнетизма)

В рамках приближения когерентного локатора для  $s-d$ -модели с учетом недиагонального беспорядка рассчитаны электронная структура, электросопротивление и коэффициент Холла аморфных сплавов  $Cu_{1-x}Zr_x$ . Результаты расчета концентрационной зависимости электросопротивления и коэффициента Холла согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Для интерпретации экспериментальных данных относительно явлений переноса в аморфных сплавах на основе переходных металлов (ПМ) в настоящее время используется обобщенная модель Фабера—Займана, которая базируется на концепции слабого рассеяния  $s-p$ -подобных носителей тока, а участием в переносе  $d$ -электронов пренебрегается [1]. Хотя в ряде работ (см., напр., [2, 3]) показано, что такой подход позволяет объяснить концентрационную зависимость сопротивления  $\rho(x)$  или температурную зависимость сопротивления  $\rho(T)$  некоторых аморфных сплавов, его применение к сплавам ПМ—ПМ с незаполненными  $d$ -состояниями вызывает принципиальные трудности. Во-первых, эти сплавы характеризуются сравнительно высоким сопротивлением  $\rho \geq 150$  мкОм·см, указывающим на то, что рассеяние не является слабым. Во-вторых, у многих из этих систем коэффициент Холла  $R$  при изменении состава меняет знак с отрицательного на положительный, что противоречит исходной модели. Для устранения этого противоречия привлекается концепция аномальной дисперсии [1, 4], обусловленной эффектами  $s-d$ -гибридизации. В-третьих, при возможном участии  $d$ -состояний в проводимости возникает значительный произвол в выборе исходных параметров модели, и в частности эффективной валентности сплава [1, 2], так как электронная структура сплава не рассчитывается, а считается известной.

В данной работе используется другой, в значительной степени устраняющий указанные выше недостатки, подход к расчету явлений переноса в аморфных сплавах ПМ—ПМ, базирующийся на приближении когерентного потенциала (ПКП). Как известно [5], ПКП успешно применяется для расчета кинетических эффектов кристаллических сплавов ПМ, для которых неприменима концепция слабого рассеяния. Последовательное обобщение ПКП на случай топологически разупорядоченных систем связано с существенными трудностями (см., напр., [6]). Поэтому в настоящей работе использована следующая, простая в вычислительном отношении схема. Сначала в рамках ПКП, а именно в приближении когерентного локатора, для  $s-d$ -модели с учетом недиагонального беспорядка рассчитывается одночастичная функция