Письма в ЖЭТФ, том 42, вып. 10, стр. 409 – 411 *25 ноября 1985 г.*

ЛОКАЛИЗАЦИОННЫЙ ПЕРЕХОД В АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ КУЛОНОВСКОЙ СИСТЕМЕ

Л.И.Глазман, Р.А.Сурис

Исследовано распределение электронов, компенсирующих заряд бесконечно длинного цилиндра. Показано, что по достижении температурой критического значения T_c происходит полная делокализация электронов, сосредоточенных при $T < T_c$ вблизи цилиндра.

Цель работы – найти распределение заряженных частиц в поле противоположно заряженного цилиндра. Примером такой системы может служить чистый полупроводник с дислокацией [1] или цепочкой доноров (акцепторов). Поясним специфику задачи, рассмотрев сначала ее одномерный и трехмерный аналоги.

Известно, как распределены электроны вблизи положительно заряженной плоскости, когда полный их заряд точно компенсирует заряд плоскости. В классическом пределе их концентрация (см., например, [2])

$$n(x) = \frac{\epsilon T}{2\pi e^2}\left[x + \frac{\epsilon T}{2\pi e\sigma}\right]^{-2}, \tag{1}$$

и интеграл от нее по нормальной к плоскости координате x сходится. Здесь e – величина заряда электрона, ϵ – диэлектрическая проницаемость среды, σ – поверхностная плотность заряда, T – температура в энергетических единицах. Таким образом, электроны оказываются локализованными. В противоположность этому, заряженная сфера не может удержать компенсирующий ее заряд электронов. "Убегание" электронов на бесконечность обусловлено выигрышем в их энтропии и убыванием потенциала сферы с расстоянием.

Обратимся теперь к заряженному цилиндру. С одной стороны, он создает логарифмически растущий на бесконечности потенциал, который мог бы удержать электроны. С другой стороны, энтропия логарифмически растет с увеличением занятого ими объема. Поэтому удержание электронов при низких температурах сменится их делокализацией при высоких. Оценим температуру такого перехода. Сначала пренебрежем экранированием. Поскольку потенциал цилиндра $\varphi = (2q/\epsilon)\ln(r/a)$, где q и a – его линейная плотность заряда и радиус, электронная концентрация есть

$$n(r) = C\exp\left(-\frac{e\varphi}{T}\right) = C(a/r)^{\frac{2qe}{\epsilon T}}.$$

Нормировочная константа C задается условием электронейтральности

$$2\pi\int_a^\infty n(r)r\,dr = q/e.$$

При $qe/\epsilon T > 1$ интеграл сходится и $C \neq 0$ – электроны сосредоточены возле цилиндра. Их концентрация падает быстрее, чем r^{-2}. Если же $qe/\epsilon T < 1$, то интеграл расходится и $C = 0$ – электроны "убегают" от цилиндра на бесконечность. Критическая температура перехода электронов в полностью делокализованное состояние $T_c = qe/\epsilon$ [1)].

[1)] Например, для цепочки доноров со средним расстоянием между ними 60 Å и при характерном для полупроводников значении $\epsilon \cong 10$ температура $T_c \cong 240$ К.

Экранирование ослабляет удерживающий потенциал. Для цилиндра потенциал φ в приближении среднего поля определяется уравнением

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(r\frac{d\varphi}{dr}\right)=-\frac{4\pi}{\epsilon}C\exp\left(-\frac{e\varphi}{T}\right). \tag{2}$$

Граничное условие при $r=a$ есть равенство поля его неэкранированному значению: $\varphi'(a)=2q/\epsilon a$. За соблюдением нейтральности, определяющей второе граничное условие, удобно проследить, введя ограничивающий объем коаксиальный цилиндр радиуса R. Из (2) следует

$$\ln\left(\frac{r}{a}\right)=2\int_{-2T_c/T}^{\rho}\frac{d\rho}{(\rho+2)^2+\gamma},$$

где $\rho(r)=-er\varphi'(r)/T$. Условие нейтральности

$$\ln\left(\frac{R}{a}\right)=2\int_{-2T_c/T}^{\infty}\frac{d\rho}{(\rho+2)^2+\gamma} \tag{3}$$

задает зависимость константы γ от T. Концентрация

$$n(r)=\frac{\epsilon T}{8\pi e^2r^2}\left[(\rho+2)^2+\gamma\right].$$

Рассмотрим сначала температуры $T<T_c$. Из (3) видно, что при $R/a\to\infty$ параметр $\gamma\approx 4\pi^2/\ln^2(R/a)$ и стремится к нулю. Таким образом, с точностью до $\ln^{-2}(R/a)$ концентрация электронов у поверхности цилиндра

$$n(a)=\frac{\epsilon T}{2\pi e^2a^2}\left(\frac{T_c}{T}-1\right)^2.$$

Обращение в нуль $n(a)$ при $T=T_c$ и означает делокализацию электронов.

При $T>T_c$ из условия нейтральности (3) следует, что

$$\gamma\approx 4\left(1-\frac{T_c}{T}\right)^2\left\{-1+4\frac{T_c}{T}\left(2-\frac{T_c}{T}\right)^{-1}\exp\left[-2\left(1-\frac{T_c}{T}\right)\ln\frac{R}{a}\right]\right\}$$

и концентрация $n(a)$ обращается в нуль с ростом R как $\exp\left[-2\left(1-\frac{T_c}{T}\right)\ln\frac{R}{a}\right]$.

При $T<T_c$ в пределе $R/a\to\infty$

$$n(r)=n(a)\left(\frac{a}{r}\right)^2\left[\frac{\ln(r/a)}{\ln(r_c/a)}+1\right]^{-1}, \tag{4}$$

где корреляционный радиус $r_c(T)=a\exp\left(\frac{T}{T_c-T}\right)$. Любопытная особенность выражения (4) состоит в том, что заряд, получаемый его интегрированием по объему, меньше q на величину $\epsilon T/e$. Этот дефицит обусловлен делокализацией электронов за пределами цилиндра с радиусом $\sim r_c$, так как при $r\gtrsim r_c$ потенциал ослаблен экранированием.

Итак, мы видим, что при $T=T_c$ в пределе $R/a\to\infty$ система претерпевает перестройку, напоминающую фазовый переход. Этот переход не есть следствие "упорядочивающего" влияния межчастичного взаимодействия. Напротив, кулоновское отталкивание между электронами способствует разрушению исходного порядка, навязанного полем цилиндра. Характеристики системы сингулярны в точке перехода. Причина состоит в исчезновении экранировки, или, другими словами, обращении в нуль поляризации системы электронов. Это четко проявляется в следующем из (4) распределении электрического поля:

$$\frac{E(r, T=\infty)}{E(r, T)} - 1 = \begin{cases} \left(\dfrac{T_c}{T} - 1\right)^2 \dfrac{\ln(r/a)}{T_c/T + (T_c/T - 1)\ln(r/a)}, & T < T_c \\ 0, \ T > T_c \end{cases}$$

Вторая производная поля, а значит, и электрической емкости, по T претерпевает скачок в точке перехода. Скачок испытывает и электронная теплоемкость, приходящаяся на единицу длины: $\Delta C_v = (2\epsilon T/e^2)\ln(R/a)$.

Разумеется, о скачке можно говорить лишь при стремлении к бесконечности внешнего радиуса системы R. Логарифмическая расходимость C_v при $R \to \infty$ и $T < T_c$ обусловлена тем, что уход электронов на периферию сопряжен с преодолением логарифмического потенциала. Если система ограничена, то переход размывается. Интервал этого размытия δT легко оценить, сравнив корреляционный радиус r_c с R: $\delta T/T_c \sim 1/\ln(R/a)$. К такому же эффекту приводит дебаевское экранирование свободными носителями, если заряженный цилиндр погружен в плазму; вместо R в предыдущую оценку войдет радиус экранирования. Переход размывается и в системе со многими цилиндрами, распределенными с конечной плотностью ν. Если $\nu a^2 \ll 1$, то во всех выражениях следует заменить R величиной порядка $\nu^{-1/2}$.

Полученный локализационный переход обладает необычной чертой – роль флюктуаций не растет, а, напротив, падает по мере приближения к T_c. Действительно, чем меньше $T_c - T$, тем меньше плотность электронов, а значит, тем точнее использованное нами приближение среднего поля.

Мы считали электроны невырожденными. Это справедливо при $T \to T_c$, когда $n(r) \to 0$. С понижением температуры концентрация электронов у цилиндра растет. Когда $n(a)$ превзойдет величину $\sim (mT/\hbar^2)^{3/2}$ (m – эффективная масса), электроны окажутся вырожденными, и в пределе высокой плотности, $(q/e)a_B \gg 1$ (a_B – эффективный боровский радиус) их можно описать в приближении Томаса – Ферми [3,4]. В противоположном пределе речь идет по сути о цепочке атомов. И здесь при $T \to T_c$, когда расстояние между ними много меньше r_c, все сказанное о переходе справедливо. И хотя при $T < T_c$ электроны локализуются на отдельных атомах, доля делокализованных электронов остается равной $\epsilon T/eq$, так как на больших расстояниях частицы не "чувствуют" дискретности распределения зарядов.

Литература

1. *Матаре Г.* Электроника дефектов в полупроводнеках. М., 1974.
2. *Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г.* Физика полупроводниках. М., 1977.
3. *Гергель В.А., Сурис Р.А.* ФТП, 1982, 16, 1925.
4. *Глазман Л.И.* ФТП, 1985, 19, № 10.

Поступила в редакцию
28 июля 1985 г.

После переработки
9 октября 1985 г.