

2.6 Metall-Isolator-Übergänge

2.6.1 Mottscher Metall-Isolator-Übergang

Nehme Metall und vergrößere Gitterabstand a

→ Verringerung des Überlapps der Wellenfunktionen der atomaren Niveaus
 → irgendwann lokalisieren e^- am Rumpf \Rightarrow Isolator

oder

betrachte **Kristall aus H-Atomen** bei $T=0$:

je 1 H-Atom in primitiver Einheitszelle ¹ → fester Wasserstoff sollte ein Metall sein,
 da das Energieband halb gefüllt ist.

Abschätzung von Mott:

ob fester Wasserstoff metallisch oder isolierend ist hängt von der Gitterkonstanten des Kristalls ab,

d.h. es gibt einen **kritischer Abstand** $a_c = 4.5a_0$ bei dem ein Metall-Isolator-Übergang stattfindet

($a_0 = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} = 1$. Bohrscher Radius des H-Atoms).

→ unter extremem Druck (z.B. im Planet Jupiter) besteht die Möglichkeit dass Wasserstoff metallisch wird.

Nährungsweise Betrachtung:

Ausgangspunkt sei ein metallischer Zustand;

→ ein Leitungselektron spürt ein abgeschirmtes Coulomb-Potential der Protonen:

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-k_s r} \quad (2.108)$$

Gemäß (2.89) gilt

$$k_s^2 = 4 \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \frac{n_0^{\frac{1}{3}}}{a_0} = \frac{3.939 n_0^{\frac{1}{3}}}{a_0} \quad (2.109)$$

Bei hoher Elektronenkonzentration n_0 → k_s ist groß (effektive Abschirmung)
 → Potential hat keinen gebundenen Zustand
 \Rightarrow Metall

¹anders bei H₂-Molekül je Einheitszelle → gefülltes Band

Aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein abgeschirmtes Coulomb-Potential folgt:²

Es existiert ein gebundener Zustand wenn

$$k_s < \frac{1.19}{a_0} \quad (2.110)$$

D.h., in diesem Fall können Elektronen an den Protonen kondensieren \Rightarrow Isolator

Mit (2.109) lautet diese Bedingung

$$k_s^2 = \frac{3.939n_0^{\frac{1}{3}}}{a_0} < \left(\frac{1.19}{a_0}\right)^2 \quad (2.111)$$

Für ein einfaches kubisches Gitter (Gitterkonstante a) gilt: $n_0 = \frac{1}{a^3}$

Dies in (2.111) eingesetzt liefert eine Relation für den kritischen Abstand

$$\begin{aligned} \frac{3.939}{a_c a_0} &= \left(\frac{1.19}{a_0}\right)^2 \\ \Leftrightarrow a_c &= \frac{3.939 a_0}{1.19^2} = 2.78 a_0 \end{aligned} \quad (2.112)$$

also ein Ergebnis nahe dem Mott-Resultat.

Allgemein:

Metall-Isolator-Übergang = Übergang in Abhängigkeit von äußerem Parameter
(Zusammensetzung, Druck, Dehnung, Magnetfeld,
...)

- metallische Phase: gewöhnlich beschrieben durch Modell unabhängiger Elektronen

- isolierende Phase: oft charakterisiert durch starke e^-e^- -Wechselwirkung

Anmerkungen:

- Ein Übergang Isolator \rightarrow Metall ist auch möglich infolge zufälliger (steigender) Besetzung von Gitterplätzen \rightarrow *Perkolations-Theorie*.
- Ein Metall-Isolator-Übergang kann auch getrieben sein durch Erhöhung der 'Unordnung' in einem Kristall, d.h. durch eine wachsende Störung des periodischen Kristallpotentials \rightarrow *Anderson-Isolator* (siehe unten).

²F.J. Rogers *et al.*, Phys. Rev. **A1**, 1577 (1970)

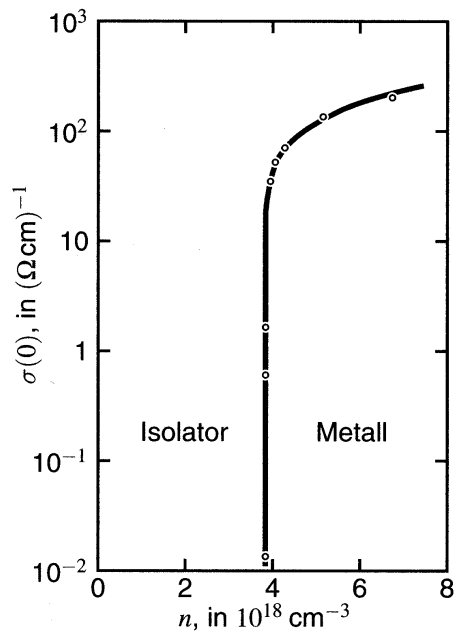
Halbleiter → Metall durch Dotierung (bei $T \approx 0$ K)Bsp.: Silizium, dotiert mit Phosphor (N_D : Donatorkonzentration)

Abb. 2.43: Halblogarithmische Darstellung der beobachteten "Nullpunktsleitfähigkeit" $\sigma(0)$ in Abhängigkeit von der Donatorkonzentration n für Phosphordotoren in Silizium. (nach T. F. Rosenbaum et al.) [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.10b].

Übergang Isolator → Metall sobald N_D groß genug → deutlicher Überlapp der Grundzustandswellenfunktionen der e^- benachbarter Donatoren

Experimenteller Wert für kritische Donatorkonzentration: $n_c = 3.74 \cdot 10^{18} / \text{cm}^3$

Unter Anwendung des Mott-Kriteriums

– wobei wir den Bohr-Radius a_0 nun durch den Radius $a_D = 32 \text{ \AA}$ für den Grundzustand des P-Donatoratoms (Kugelnäherung) ersetzen –

folgt für den kritischen Abstand der Donatoren $a_c = 4.5 \cdot a_D = 144 \text{ \AA}$.

Bei Anordnung der Donatoren in einem kubischem Gitter liefert dies eine kritische Donator-Konzentration

$$n_c = \frac{1}{a_c^3} = 0.33 \cdot 10^{18} / \text{cm}^3$$

(Faktor 10 weniger als gemessen).

D.h. die zufällige Besetzung der Donatoren schiebt den Isolator-Metall-Übergang zu höheren Donatorkonzentrationen.

Im metallischen Zustand: **entarteter Halbleiter**.

2.6.2 Peierls-Instabilität: 1-dimensionale Metalle

Betrachte 1-dimensionales Metall bei $T = 0$

im e^- -Gas sind alle Niveaus des LB bis zum Wellenvektor k_F aufgefüllt.

Peierls:

System ist instabil gegen statische Gitterdeformation mit Wellenvektor $G = 2k_F$

→ spontane Ausbildung einer statischen Gitterdeformation

⇒ Energielücke an Fermi-Fläche

(Erniedrigung der Energie der e^- unterhalb der Energielücke)

⇒ **Peierls-Isolator** Beispiel : TaS₃

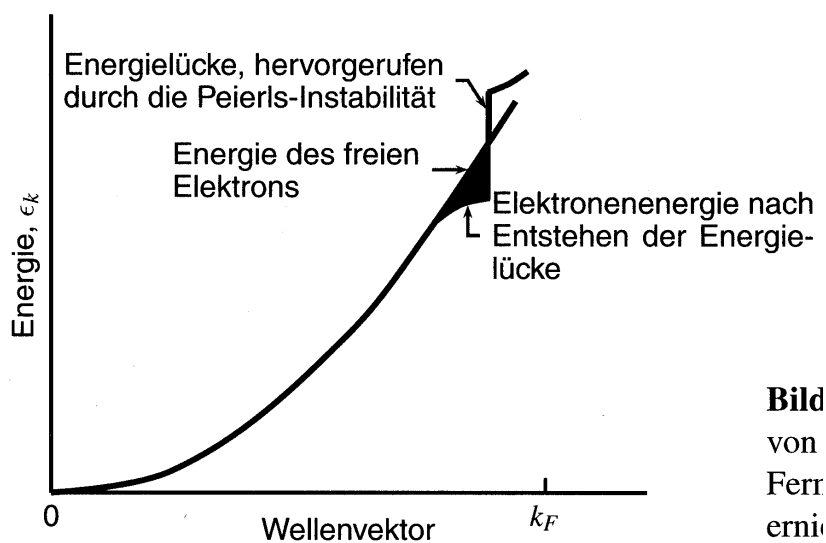


Abb. 2.44: Peierls-Instabilität. Die Energie von Elektronen mit Wellenvektor nahe der Fermi-Fläche wird durch eine Gitterdeformation erniedrigt [aus Ch. Kittel, *Einführung in die Festkörperphysik* (1999); Abb.10.20].

Die Gitterdeformation schreitet fort bis der Gewinn an elektronischer Energie ϵ_{elektr} durch das Anwachsen der elastischen Energie ϵ_{elast} kompensiert wird.

Quantitativ:

Gleichgewichtsdeformation Δ gegeben durch

$$\frac{d}{d\Delta}(\epsilon_{\text{elektr}} + \epsilon_{\text{elast}}) = 0 \quad (2.113)$$

- Elastische Energie ϵ_{elast} :

Wir betrachten die elastische Verformung $\Delta \cdot \cos 2k_F x$

→ räumliches Mittel der elastischen Energie/Länge

$$\epsilon_{\text{elast}} = \frac{1}{2} C \Delta^2 \langle \cos^2 2k_F x \rangle = \frac{1}{4} C \Delta^2 \quad (2.114)$$

(C : Kraftkonstante des linearen Metalls)

- Elektronische Energie ϵ_{elektr} :

Ionischer Beitrag zum Gitterpotential U für LE sei proportional zur Deformation:

$$U(x) = 2A\Delta \cos 2k_F x \quad (2.115)$$

Löse Wellengleichung für Bloch-Welle (Hauptgleichung \rightarrow Physik IVb) eines Elektrons in einem periodischen Potential U (mit Fourier-Komponenten U_G)

$$(\lambda_k - \epsilon)C_k + \sum_G U_G C_{k-G} = 0 \quad (2.116)$$

($\lambda_k \equiv \hbar^2 k^2 / 2m$; C_k : Fourier-Komponenten der Bloch-Wellenfunktion).

für obiges Gitterpotential (2.115).

Aus der Näherungslösung für die Energie ϵ nahe der Zonengrenze (\rightarrow Physik IVb)

$$\epsilon_K = \frac{\hbar^2}{2m} ((G/2)^2 + K^2) \pm [4\lambda(\hbar^2 K^2 / 2m) + U^2]^{1/2} \quad (2.117)$$

($K \equiv k - (G/2)$; $\lambda \equiv \hbar^2 (G/2)^2 / 2m$)

folgt mit $G = 2k_F$ und $U \equiv A\Delta$

$$\begin{aligned} \epsilon_K &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_F^2 + K^2) \pm \sqrt{4 \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \cdot \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + A^2 \Delta^2} \\ &= \frac{1}{2} (x_F + x_K) \pm \sqrt{x_F x_K + A^2 \Delta^2} \end{aligned} \quad (2.118)$$

(mit $x_K \equiv \frac{\hbar^2 K^2}{m}$, $x_F \equiv \frac{\hbar^2 k_F^2}{m}$)

Mit dem Minuszeichen aus (2.118) für das Band unterhalb des Fermi-Niveaus folgt

$$\frac{d\epsilon_K}{d\Delta} = \frac{-A^2 \Delta}{\sqrt{x_F x_K + A^2 \Delta^2}} \quad (2.119)$$

Mit $x \equiv \frac{\hbar^2 K k_F}{m} = \frac{x_F}{k_F} K$ und mit $\epsilon_{elektr} = \int_{-k_F}^{k_F} \epsilon_K dK / \pi$

(ϵ ist Energie/Länge und die Zustandsdichte im 1D k -Raum ist $2 \cdot L / 2\pi$)

gilt dann

$$\begin{aligned} \frac{d\epsilon_{elekt}}{d\Delta} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{k_F} dK \frac{d\epsilon_K}{d\Delta} \\ &= \frac{-2A^2 \Delta}{\pi} \int_0^{k_F} \frac{dK}{\sqrt{x_F x_K + A^2 \Delta^2}} \\ dK \rightarrow \frac{k_F}{x_F} dx &= \frac{-2A^2 \Delta}{\pi} \frac{k_F}{x_F} \int_0^{x_F} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + A^2 \Delta^2}} \\ &= \frac{-2A^2 \Delta}{\pi} \frac{k_F}{x_F} \operatorname{arcsinh} \frac{x_F}{A\Delta} \end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Gleichgewichtsdeformation aus

$$\frac{d\epsilon_{\text{ges}}}{d\Delta} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2}C\Delta - \frac{2A^2m\Delta}{\pi\hbar^2k_F} \operatorname{arcsinh} \frac{\hbar^2k_F^2}{mA\Delta} = 0 \quad (2.120)$$

Lösung Δ mit minimaler Energie ist gegeben durch

$$\frac{\hbar^2k_F^2}{mA\Delta} = \sinh \left(- \underbrace{\frac{\pi\hbar^2k_FC}{4mA^2}} \right) \quad (2.121)$$

oder für $\frac{\hbar^2k_F^2}{mA\Delta} \gg 1$:

$$A\Delta \approx \frac{2\hbar^2k_F^2}{m} \exp \left(- \frac{\pi\hbar^2k_FC}{4mA^2} \right) \quad (2.122)$$

Aus (2.118) folgt für die Energie an der Zonengrenze ($K = 0$)

$$\epsilon_0 = \epsilon_F \pm A\Delta \quad (2.123)$$

d.h., der Ausdruck in (2.122) liefert den Wert der Energielücke infolge der Peierls-Instabilität (s. Abb.2.44).

Setze $W = \frac{\hbar^2k_F^2}{2m}$ = Breite des Leitungsbandes;
 $N(0) = \frac{2m}{\pi\hbar^2k_F}$ = Niveaudichte an der Fermi-Kante;
 $V = \frac{2A^2}{C}$ = effektive e^-e^- -Wechselwirkungsenergie.

Dann läßt sich (2.122) umschreiben als

$$A\Delta \approx 4W e^{-\frac{1}{N(0)V}} \quad (2.124)$$

analog zur Gleichung für die Energielücke im Supraleiter (BCS-Theorie).

Anmerkungen:

- Supraleitung: e^- -Phonon-Wechselwirkung $\rightarrow e^- - e^-$ -Paare (Cooper-Paare)
 \rightarrow Energielücke Δ ,
mit $\Delta = \text{const} \cdot e^{-\frac{1}{N(0)V}}$
Für Anregungen (Quasiteilchen) aus Kondensat muß Energielücke überwunden werden.
- zu Peierls-Übergang analoge Übergänge: Ladungsdichtewellen
Spindichtewellen

2.6.3 Lokalisierung von Ladungsträgern durch Unordnung

”Klassische” Beschreibung von elektrischen Eigenschaften von Festkörpern:

idealer Kristall mit periodischer Gitterstruktur

→ Bloch-Wellen, Bandstruktur

Beschreibt über den Kristall ausgedehnte elektronische Zustände.

Liefert für die elektrische Leitfähigkeit im idealen Kristall $\sigma \rightarrow \infty$.

Genauere Betrachtung (in Metallen):

der elektrische Transport

– und damit die elektrische Leitfähigkeit, bzw. der spez. Widerstand–

ist bestimmt durch Streuung an Phononen und Defekten (geringe Konzentration)

Beschreibung durch Drude-Theorie, bzw. Boltzmann-Transportgleichung

→ ”Diffusion” der e^-

→ spezifischer Widerstand $\rho(T) = \rho_0 + AT^n$

(Defekte und Unordnung \Rightarrow Restwiderstand bei $T = 0$)

Funktioniert einigermaßen für **schwache Unordnung**

(mittlere freie Weglänge l groß gegen Fermi-Wellenlänge $\lambda_F = 2\pi/k_F$, d.h. $k_F l \gg 1$)

(Abweichungen führen zur ”schwachen Lokalisierung”³)

Im folgenden betrachten wir elektrisch leitfähige Materialien mit stark gestörter Ordnung:

amorphe Metalle, Legierungen, metallische Gläser, dotierte Halbleiter

P.W. Anderson (1958):⁴

falls Unordnung genügend stark → spektakuläre Auswirkungen auf elektrischen Transport möglich

→ **Lokalisierung der Elektronen**,

d.h. die Wellenfunktion ist nicht mehr über den ganzen Kristall ausgedehnt, sondern räumlich lokalisiert

bei $T = 0$ ist keine Diffusion der Elektronen möglich \Rightarrow **Anderson-Isolator**

(”Anderson-Lokalisierung”, ”starke Lokalisierung”)

→ grundlegend verschiedener Ansatz:

betrachte Natur der Wellenfunktion eines Elektrons in zufällig angeordnetem Potential (Unordnung wird nicht mehr nur als ”Störung” des periodischen Potentials behandelt)

Anderson’s Ansatz lieferte grundlegend neues Verständnis des elektronischen Transports bei tiefen Temperaturen

³siehe z.B. P. Grünberg, *Experimente zur schwachen Lokalisierung*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988)

⁴P.W. Anderson, *The absence of diffusion in certain random lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)

Lokalisierung in 1-dim. ungeordneten Systemen

• Kronig-Penney-Modell:

1-dim. **periodisches** Potential $U(x)$

als periodische Anordnung von rechteckförmigen Potentialbarrieren (Höhe U_0), bzw. Potentialtöpfen

Lösung der Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + U(x)\Psi = \epsilon\Psi \quad (2.125)$$

liefert zwischen den Barrieren ($U = 0$ innerhalb der Potentialtöpfe) oszillatorisches Verhalten

$$\Psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \quad (2.126)$$

d.h. die Eigenfunktion ist eine Linearkombination von ebenen Wellen

(mit Energieeigenwert $\epsilon = \hbar^2 K^2/2m$),

die nach links und nach rechts laufen.

Innerhalb der Barrieren hat die Lösung der Schrödinger-Gleichung die exponentielle Form

$$\Psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \quad \text{mit} \quad U_0 - \epsilon = \hbar^2 Q^2/2m \quad (2.127)$$

Diese Lösungen müssen so aneinander gefügt werden, dass $\Psi(x)$ und $d\Psi/dx(x)$ an den Grenzen stetig sind.

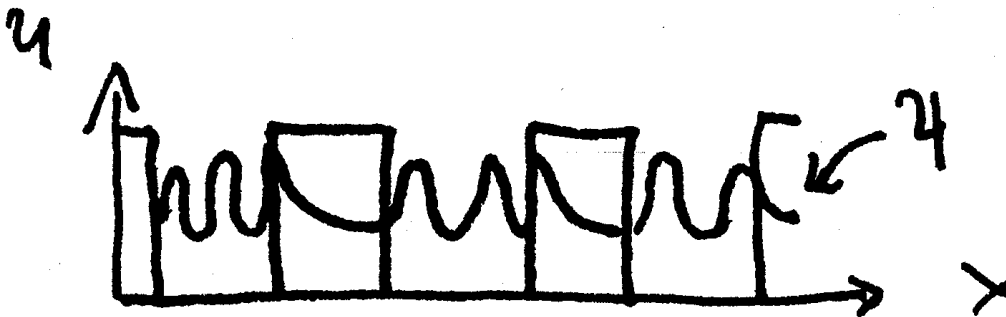


Abb. 2.45: 1-dimensionale Wellenfunktion im Kronig-Penney-Modell

→ liefert (laufende) Blochwellen mit Energielücke in $\epsilon(k)$ -Relation.

- Einführung von **Unordnung**

(Mott, Twose ⁵)

in 1-dimensionalen Systemen hat schon eine geringe Unordnung drastische Auswirkungen auf die elektrischen Transporteigenschaften.

Die Entfernung b_i zwischen benachbarten Barrieren $i - 1$ und i sei eine räumlich fluktuierende Größe mit Mittelwert $\bar{b}_i \equiv b$ und Breite $\Delta b \equiv (\bar{b}_i^2 - b^2)^{1/2}$

Rechnung ergibt:

exponentiellen Anstieg der Wellenfunktion bei Durchgang durch Barriere.

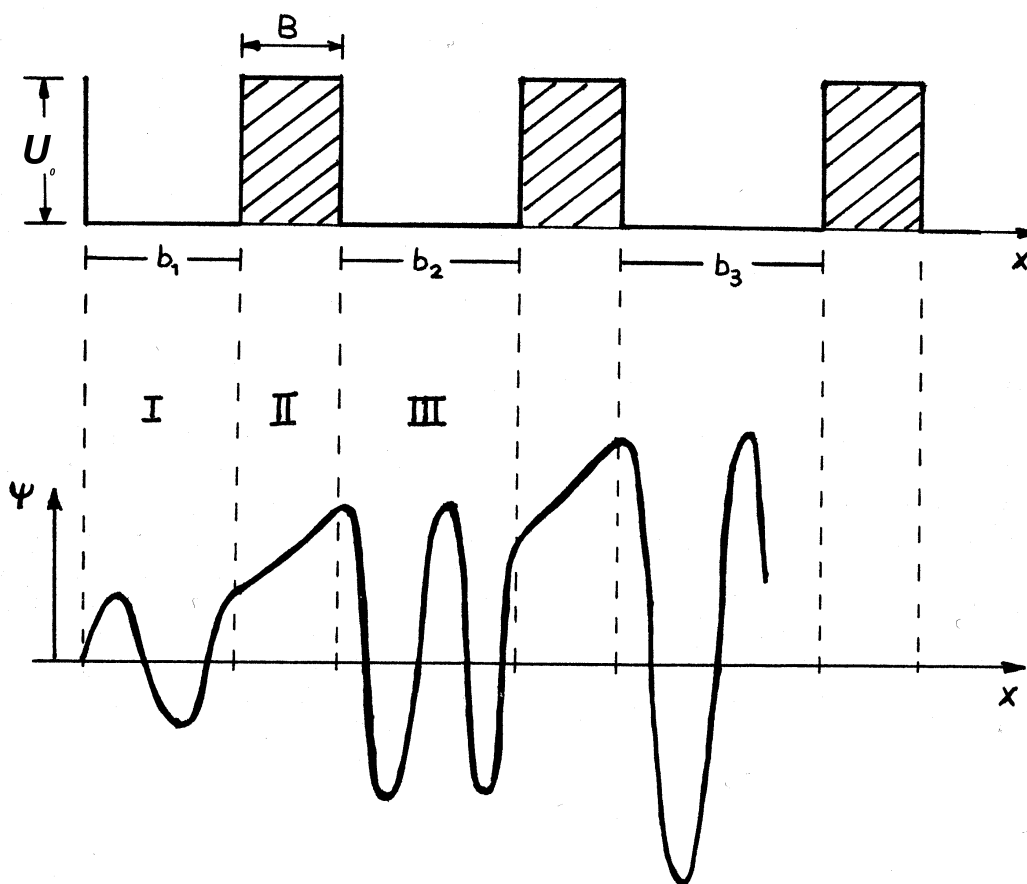


Abb. 2.46: Lösung der Schrödinger-Gleichung im ungeordneten Kronig-Penney-Potential (nach Mott und Twose) [aus H.W. Diehl, *Lokalisierung*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988), Abb.9.1].

⁵N.F. Mott and W.D. Twose, Adv. Phys. 10, 107 (1961)

• Kronig-Penney-Potential mit zufallsverteilten Potentialhöhen (Anderson)

- (a) e^- in regelmäßigem Gitter
 → erlaubte Energien in "tight binding" Band der Breite B
- (b) Unordnung durch überlagertes Zufallspotential V für jeden Potentialtopf,
 mit $-V_0/2 < V < V_0/2$
 → Maß für Unordnung ist $\delta = f(V_0/B)$

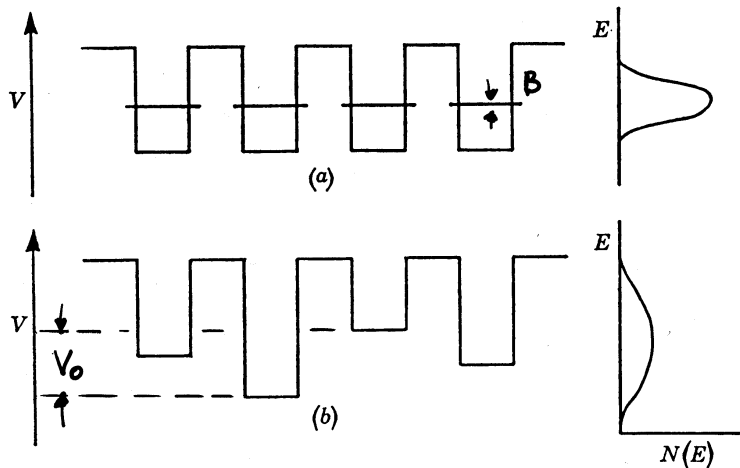


Abb. 2.47: Potentielle Energie für Elektronen im Anderson-Modell (a) vor und (b) nach der Überlagerung eines Zufallspotentials; Zustandsdichte $N(E)$ ist rechts gezeigt [aus W. Gudat, *Ausgewählte experimentelle Beiträge zum Lokalisierungsproblem*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988), Abb.10.1].

Falls Unordnung groß $\delta > \delta_c$:

→ Wellenfunktionen sind *exponentiell lokalisiert*

d.h. Einhüllende fällt exponentiell vom Zentrum r_0 ab

$$|\Psi(r)| \propto e^{-\frac{|r-r_0|}{\xi}} \quad (\xi : \text{Lokalisierungslänge}) \quad (2.128)$$

→ lokalisierte Wellenfunktion $\Rightarrow \sigma \rightarrow 0$ **Isolator**

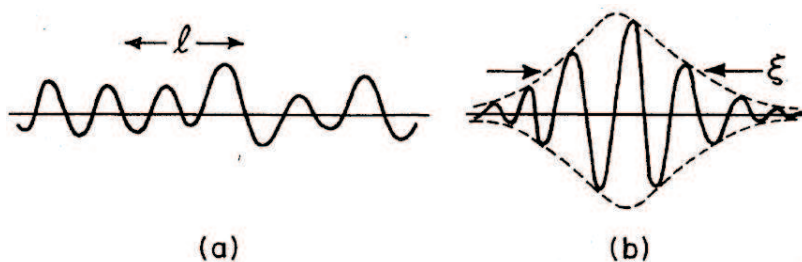


Abb. 2.48: Typische Wellenfunktionen (a) eines ausgedehnten Zustands mit mittlerer freier Weglänge l ; (b) eines lokalisierten Zustands mit Lokalisierungslänge ξ [aus P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, *Disordered Systems*, Rev. Mod. Phys. **57**, 287-337 (1985); Abb.1].

→ **In einer Dimension** reicht bereits relativ geringe Unordnung,
 damit keine ausgedehnten Wellenfunktionen mehr existieren!

höhere Dimensionen

auch in Gegenwart von Unordnung können sich Bloch-ähnliche ausgedehnte Zustände ausbilden. Jedoch geht die Phasenkohärenz innerhalb mittlerer freier Weglänge l verloren s. Abb.2.48(a)].

Anderson-Übergang:

→ Lokalisierung **aller** Zustände, wenn Unordnung δ einen Schwellwert δ_c überschreitet.

Für **geringere Unordnung** ($\delta < \delta_c$):

Koexistenz von lokalisierten und ausgedehnten Zuständen energetisch getrennt durch *Mobilitätskante* $E_c(\delta)$.

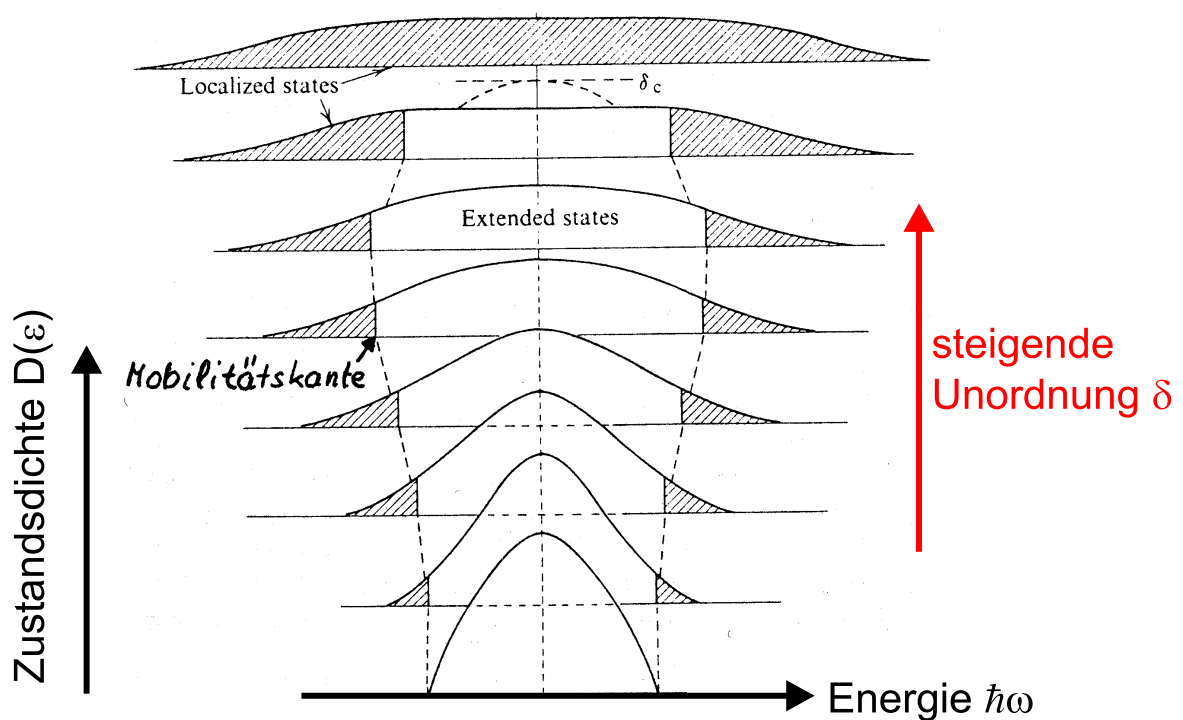


Abb. 2.49: Änderung der Zustandsdichte als Funktion der Unordnung [aus H.W. Diehl, *Lokalisierung*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988), Abb.9.10].

Solange Fermi-Energie im Bereich der ausgedehnten Zustände liegt existiert endliche Leitfähigkeit.

nach Skalentheorie:

Leitfähigkeit nimmt kontinuierlich ab; wird Null wenn $\epsilon_F \leq E_c$

Mott:

An der Mobilitätskante fällt die Leitfähigkeit diskontinuierlich auf Null

Bei $\epsilon_F = E_c$: minimale metallische Leitfähigkeit σ_{min}

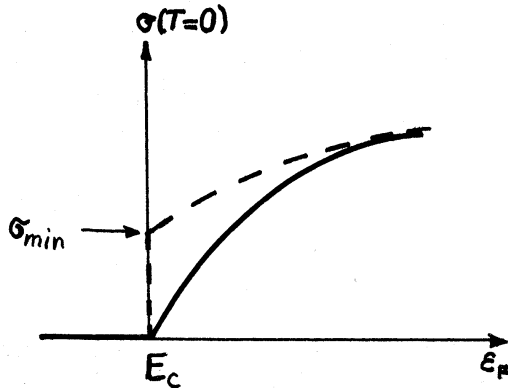


Abb. 2.50: Schematischer Verlauf der Leitfähigkeit $\sigma(T = 0)$ an der Mobilitätskante E_c ; [aus H.W. Diehl, *Lokalisierung*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988), Abb.9.11].

→ aus Anderson's Theorie folgt für minimale Leitfähigkeit

$$\sigma_{min} = \frac{e^2}{h} \frac{n}{k_F} \quad (2.129)$$

Speziell in zwei bzw. drei Dimensionen gilt dann

$$\begin{aligned} \text{2D:} \quad \sigma_{min}^{2d} &\approx 0,1 \frac{e^2}{h} \approx 0,6 \cdot 25 \text{k}\Omega^{-1} && \text{universell!} \\ \text{3D:} \quad \sigma_{min}^{3d} &\approx \frac{1}{3\pi^2 a} \frac{e^2}{h} \approx 300 (\text{\AA cm})^{-1} && (a : \text{Gitterkonstante}) \end{aligned}$$

Das Phänomen heißt **starke Lokalisierung** oder **Anderson-Lokalisierung**

Anmerkung: Dimension von σ :

mit $\vec{j} = \vec{\sigma} \vec{E}$ (\vec{j} ist in zwei Dimensionen $\frac{\text{A}}{\text{m}}$ und in drei $\frac{\text{A}}{\text{m}^2}$; $[\vec{E}] = \frac{\text{V}}{\text{m}}$).

→ $\sigma \rightarrow \frac{\text{A}}{\text{V m}} = \Omega^{-1} \text{m}^{-1}$ in drei Dimensionen

→ $\frac{\text{A}}{\text{V}} = \Omega^{-1}$ in zwei Dimensionen

experimentelle Untersuchungen:

dotierter Halbleiter (Si:P) = ideales Testsystem für M-I-Übergang
in ungeordneten Systemen

Donatoren werden statistisch in Wirtsgitter eingebaut

- geringer Dotierungsgrad:
Energieverteilung ist groß im Vergleich zur Bandbreite \leftrightarrow hoher Unordnungsgrad
 \Rightarrow Lokalisierung
- hoher Dotierungsgrad:
Ausbilden ausgedehnter Zustände
diese sind durch E_c von lokalisierten Zuständen getrennt
bei Hinzufügen weiterer Donatoren steigt ϵ_F über E_c
 \Rightarrow I-M-Übergang bei kritischer Donatorkonzentration
Bsp.: Si:P $\rightarrow n_c = 3.74 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

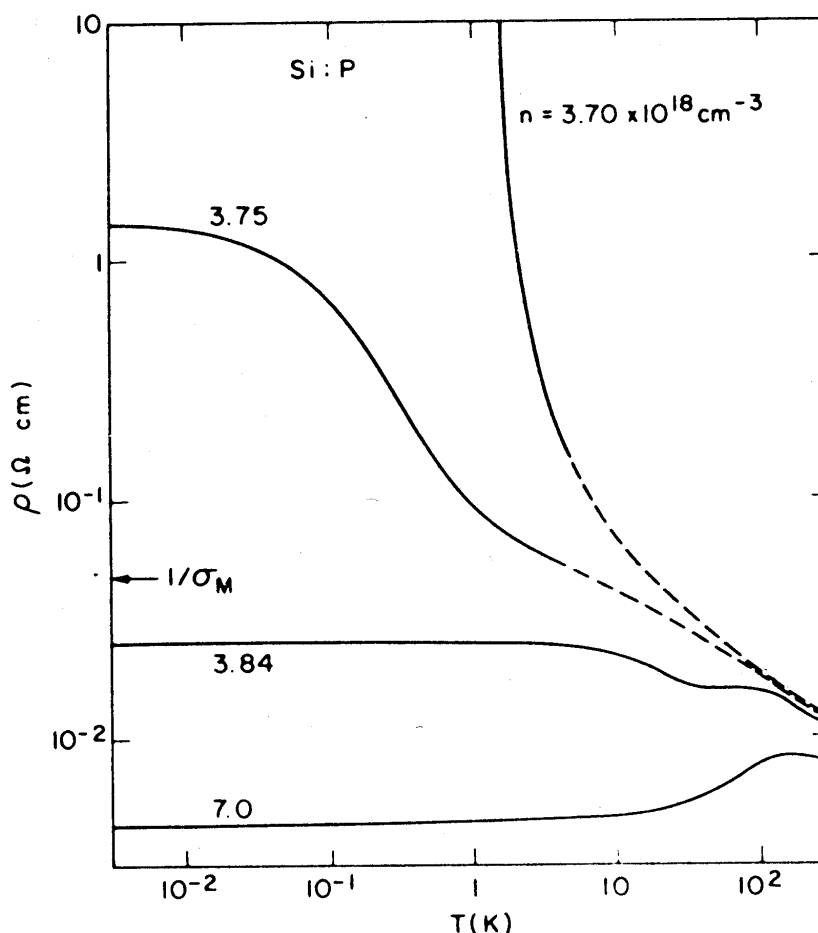


Abb. 2.51: Spezifischer Widerstand ρ als Funktion von T für vier unterschiedlich dotierte Proben Si:P im Isolator und Metallbereich [aus W. Gudat, *Ausgewählte experimentelle Beiträge zum Lokalisierungsproblem*; in 19. IFF Ferienkurs *Supraleitung und verwandte Quantenphänomene* FZ Jülich (1988), Abb.10.5].

