1982 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 24, в. 12

1982 SOLID STATE PHYSICS Vol. 24, № 12

САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ПРОСТРАНСТВАХ С РАЗМЕРНОСТЬЮ $2 \leqslant d < 4$

А. В. Мясников, М. В. Садовский

Самосогласованная теория локализации электронов в неупорядоченных системах, предложенная Фоллхардом и Вольфле, обобщается на случай пространств с размерностью $2 \leqslant d < 4$. Найдено положение порога подвижности и критическое поведение физических величин вблизи него. Показано, что описание окрестности порога подвижности в самосогласованной теории связано с выходом за пределы применимости теории возмущений и потому соответствующие результаты могут иметь лишь качественный характер. Кратко обсуждается область $d \geqslant 4$, а также частотная зависимость электропроводности для $d=2$.

1. Хорошо известно, что последовательное описание локализации электронов в неупорядоченных системах наталкивается на целый ряд трудностей принципиального характера [1]. В частности, до недавнего времени не удавалось получить само явление локализации в рамках более или менее стандартного формализма современной теории, связанного с изучением усредненных функций Грина. Исключением являлся только одномерный случай, в многомерных же системах приходилось обращаться к довольно нетрадиционному подходу, восходящему еще к первой работе Андерсона [2], в рамках которого практически невозможно вести расчеты основных физических величин [1]. Существенным шагом на пути решения этой проблемы явилась, по нашему мнению, разработка в недавней работе Фоллхарда и Вольфле [3] самосогласованного подхода к теории локализации. Основным преимуществом этого подхода является его простота и известный автоматизм, позволяющий проводить обобщения в направлении учета новых механизмов рассеяния и воздействия внешних полей (см., например, работы [4, 5]). Авторы [3] рассматривали в основном двумерный случай, вызывающий особый интерес с точки зрения современной теории [1]. Их подход специально приспособлен для этого случая, что связано с использованием результатов суммирования специального класса диаграмм [3, 6, 7], приводящих к доминирующему вкладу для $d=2$. Этот подход, однако, может быть легко обобщен и на рассмотрение пространств с размерностью $d > 2$. При этом, как будет показано ниже, получаются довольно разумные и, по-видимому, качественно правильные результаты для поведения всех основных физических величин вблизи порога подвижности так же, как и для положения самого порога подвижности. После завершения нами данной работы появилась статья [8], в которой, в частности, приведены (без вывода и обсуждения) некоторые из полученных ниже результатов. Нашей целью является рассмотрение ряда вопросов, которым, на наш взгляд, уделено недостаточное внимание в работах [3-5, 8]. Это касается явной демонстрации того факта, что описание порога подвижности в пространствах с размерностью $2 < d < 4$ достигается в самосогласованной теории локализации путем выхода за пределы ее применимости, а также некоторых особенностей поведения проводимости в двумерных системах. Кратко обсуждаются также особенности теории при $d \geqslant 4$.

2. В основе самосогласованной теории локализации Фоллхарда и Вольфле [3] лежит рассмотрение усредненной по примесям двухэлектронной функции Грина и связанной с ней величины

$$\varphi_E^{RA}(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left\langle G^R(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}'_+; E+\omega)\, G^A(\mathbf{p}'_-, \mathbf{p}_-; E)\right\rangle, \tag{1}$$

где G_R, G_A — неусредненные одноэлектронные функции Грина, E — энергия электрона (энергия Ферми), ω — частота, $\mathbf{p}_\pm = \mathbf{p} \pm \frac{1}{2}\mathbf{q}$, угловые скобки обозначают усреднение по примесям. Знания величины $\varphi_E^{RA}(\omega, \mathbf{q})$ достаточно [3] для определения функции отклика типа плотность-плотность, а с ней и проводимости системы.

В результате решения приближенного «кинетического уравнения» для $\varphi_E^{RA}(\omega, \mathbf{q})$ она представляется в следующем виде (m — масса электрона)

$$\varphi_E^{RA}(\omega, \mathbf{q}) = -N(E)\frac{\omega + M_E(\mathbf{q}, \omega)}{\omega^2 + \omega M_E(\mathbf{q}, \omega) - \frac{2E}{md}q^2}, \tag{2}$$

где $M_E(\mathbf{q}, \omega)$ — так называемое «релаксационное ядро» [3], которое в общем случае определяется суммированием диаграмм для неприводимой в двухчастичном (R—A) канале вершинной части, $N(E)$ — одноэлектронная плотность состояний.

Рассматривая самосогласованное обобщение результатов суммирования графиков Лангера—Нила [6, 7], дающих доминирующую последовательность для $d=2$, Фоллхард и Вольфле находят [3] следующее самосогласованное уравнение для величины $M_E(\mathbf{q}=0, \omega)$.

$$M_E(0, \omega) = \frac{i}{\tau} - 2\rho V^2 \sum_{|\mathbf{k}|<k_0} \frac{1}{\omega - \frac{D_0 k^2}{\tau M_E(0, \omega)}}, \tag{3}$$

где $1/\tau = 2\pi\rho V^2 N(E)$ — борновская частота рассеяния электрона на примесях, случайно распределенных в пространстве с плотностью ρ, V — Фурье-образ потенциала примеси, который для простоты считается точечным, $D_0 = 2E\tau/md$ — классический коэффициент диффузии. Выбор величины импульса обрезания k_0 в (3) обсуждается ниже.

Зависящая от частоты электропроводность системы определяется выражением [3]

$$\sigma_E(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega + M_E(0, \omega)}. \tag{4}$$

Очевидно, что в металлической области $\operatorname{Re} M_E(0, \omega=0) = 0$.

В области энергий E, соответствующих локализованным состояниям, $\sigma_E(\omega \to 0) \to 0$ и одновременно становится отличной от нуля величина [4, 9]

$$A_E(\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi N(E)} \lim_{\delta\to 0} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \left\langle G^R(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}'_+; E+i\delta)\, G^A(\mathbf{p}'_-, \mathbf{p}_-; E-i\delta)\right\rangle =$$

$$= -\frac{1}{N(E)} \lim_{\omega\to 0} \omega\varphi_E^{RA}(\omega, \mathbf{q}) = \lim_{\omega\to 0} \frac{\omega M_E(\mathbf{q}, \omega)}{\omega M_E(\mathbf{q}, \omega) - \frac{2E}{md}q^2}, \tag{5}$$

определяющая «вероятность локализации». При $q \to 0$ имеем [10]

$$A_E(\mathbf{q}) \approx 1 - q^2 R_{\text{loc}}^2(E), \tag{6}$$

где радиус локализации $R_{\text{loc}}(E)$ определяется выражением

$$R_{\text{loc}}^2(E) = \frac{2E}{md\omega_0^2(E)}; \quad \omega_0^2 = -\lim_{\omega\to 0} \omega M_E(0, \omega) > 0. \tag{7}$$

Отсюда видно, что явление локализации в данном формализме связывается с расходимостью релаксационного ядра $M_E(0,\ \omega)$ при $\omega \to 0$ [3].

В [3] самосогласованное уравнение (3) рассматривалось только для $d=2$. Нетрудно обобщить это рассмотрение для произвольных размерностей пространства d. Ясно, что полученные таким образом результаты могут претендовать лишь на качественное описание локализации, так как уравнение (3) целиком основано на суммировании диаграмм Лангера—Нила, играющих выделенную роль при $d=2$. Тем не менее соответствующие расчеты интересны, как простой способ описания локализации в пространствах произвольной размерности, и, несомненно, правильно отражают некоторые особенности этого явления. Вопрос о степени их надежности подробнее обсуждается ниже.

3. Переходя в (3) к безразмерной переменной интегрирования, представим это уравнение в следующем удобном для дальнейших вычислений виде

$$M_E(\omega) = \frac{i}{\tau} + d\lambda x_0^{d-2} M_E(\omega) \int\limits_0^1 dy\, y^{d-1} \frac{1}{y^2 - \dfrac{M_E(\omega)\,\omega d}{4(x_0E)^2}}, \tag{8}$$

$$\lambda = \frac{1}{2\pi\tau E} = \left(\frac{m}{2\pi}\right)^{\frac{d}{2}} \frac{E^{\frac{d}{2}-2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)} \rho V^2, \tag{9}$$

λ — безразмерная константа связи теории, $x_0=k_0/\sqrt{2mE}$. Внимательное рассмотрение уравнений работы [3] (прежде всего определения $M_E(\mathbf{q},\ \omega)$ в уравнении (27) этой работы) приводит к выводу о том, что $k_0 \sim p_F \sim \sqrt{2mE}$ (p_F — импульс Ферми). Такой выбор импульса обрезания отмечен в [3], однако точка зрения авторов этой работы на проблему выбора k_0 не вполне ясна (ср. [8], в [4] импульс k_0 выбирается иначе. По нашему мнению, выбор импульса обрезания $k_0 \sim p_F \sim \sqrt{2mE}$ однозначен и весьма существен для всех дальнейших оценок. Очевидно, что при таком выборе мы можем считать $x_0=\text{const} \sim 1$.

Полагая в (8) $\omega=0$ и рассматривая металлический режим $\operatorname{Re} M_E(0,\ \omega=0)=0$, сразу получаем

$$\frac{i}{M_E} = \tau\left(1 - \frac{d}{d-2}\lambda x_0^{d-2}\right). \tag{10}$$

Тогда из (4) и (10) легко находим

$$\sigma_E(\omega=0) = \frac{ne^2}{m}\tau\left\{1 - \left(\frac{E_c}{E}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}; \quad 2 < d < 4, \tag{11}$$

где

$$E_c = \left\{\frac{d}{d-2}\frac{x_0^{d-2}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}(2\pi)^{-\frac{d}{2}}\right\}^{\frac{2}{4-d}} \cdot E_{sc}, \tag{12}$$

$$E_{sc} = m^{\frac{d}{4-d}} (\rho V^2)^{\frac{2}{4-d}}. \tag{13}$$

Отсюда видно, что E_c играет роль порога подвижности, причем

$$\sigma_E \approx \frac{ne^2}{m}\tau\left(\frac{4-d}{2}\right)\left(\frac{E-E_c}{E_c}\right); \quad 2 < d < 4 \tag{14}$$

при $E \geqslant E_c$. Результат (12) практически совпадает с оценкой E_c, полученной другим способом в [9]. Для $d=3$ пороговая энергия E_c попадает в область «сильной связи» $E_{sc}=m^3(\rho V^2)^2$, где проведенный отбор диаграмм, вообще говоря, несправедлив [1, 9] и требуется учет всех диаграмм теории возмущений. Это ясно уже из того, что условие $E \gg E_{sc}$ эквивалентно, согласно (9), требованию $\lambda \ll 1$, т. е. представляет собой простейший критерий применимости теории возмущений. При $d \to 2$ $E_c \to \infty$, что соответствует представлениям о полной локализации в двумерном пространстве [1, 3, 9]. Более важно, однако, то обстоятельство, что, как подробно показано в [9], равенство (12) фактически задает размер «гинзбурговской критической области» [1, 9], где существенны высшие порядки теории возмущений именно с учетом геометрического фактора $(d-2)^{2/(d-4)}$. Это означает что даже при $d \to 2$, несмотря на выполнение неравенства $E_c \gg E_{sc}$ ($\lambda \ll 1$), порог подвижности (12) попадает в область энергий, где теория возмущений (и проведенный в самосогласованной теории отбор диаграмм) несправедлива. Тем не менее можно думать, что (12) правильно оценивает положение порога подвижности по порядку величины. В тоже время линейное обращение проводимости в нуль при $E \to E_c$ в (14) не может считаться доказанным.

Переходя к рассмотрению области локализованных состояний ($E < E_c$), полагаем, согласно (7), $\omega\operatorname{Im}M_E(0, \omega) \underset{\omega\to 0}{=} 0$, $\operatorname{Re}M_E(0, \omega) = -\omega_0^2/\omega$ и умножая (8) на ω, при $\omega \to 0$ получаем уравнение, определяющее параметр ω_0^2

$$1 = d\lambda x_0^{d-2}\int_0^1 dy\, \frac{y^{d-1}}{y^2+z}; \quad z = \frac{d\omega_0^2}{4(x_0E)^2}. \tag{15}$$

Интеграл в (15) выражается через гипергеометрическую функцию, так что (15) принимает вид

$$1 = \lambda x_0^{d-2}\frac{1}{z}\,{}_2F_1\left(1, \frac{d}{2}; 1+\frac{d}{2}; -\frac{1}{z}\right). \tag{16}$$

При подходе к порогу подвижности снизу ($E \leqslant E_c$) можно воспользоваться в (16) разложением по степеням z (малые ω_0^2). После несложных вычислений находим

$\frac{d}{d-2}$

$$\omega_0^2 = \frac{4}{d}\left\{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\Gamma\left(\frac{4-d}{2}\right)\right\}^{-\frac{2}{d-2}} x_0^2E^2\left\{1-\left(\frac{E}{E_c}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}^{\frac{2}{d-2}}; \quad 2 < d < 4, \tag{17}$$

так что для радиуса локализации из (7) получаем

$\frac{d}{d-2}$

$$R_{\mathrm{loc}}(E) = \frac{1}{x_0\sqrt{2mE}}\left\{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)\Gamma\left(\frac{4-d}{2}\right)\right\}^{\frac{1}{d-2}}\left\{1-\left(\frac{E}{E_c}\right)^{\frac{4-d}{2}}\right\}^{-\frac{1}{d-2}} \sim \left(\frac{E_c-E}{E_c}\right)^{-\nu},$$
$$E \leqslant E_c; \quad 2 < d < 4, \tag{18}$$

где критический индекс радиуса локализации есть

$$\nu = \frac{1}{d-2}. \tag{19}$$

Отсюда и из (14) видно, что выполняется скэйлинговое соотношение Вегнера $s=(d-2)\nu$ для критического индекса проводимости [1]. Полученные значения критических индексов, описывающих поведение физических величин вблизи порога подвижности, совпадают с результатами, полученными в главном приближении $\varepsilon=d-2$-разложения в рамках полевого подхода, основанного на использовании нелинейных σ-моделей (см. например [11-13]), а также в рамках ε-разложения в качественной скэйлинговой теории [14]. По нашему мнению, к этим результатам не следует относиться слишком серьезно, ввиду того, что они получены путем выхода за границы применимости теории возмущений и неконтролируемой процедуры самосогласования. Тем не менее самосогласованная теория локализации [3] весьма эффективна, как простой способ получения результатов, эквивалентных получающимся в рамках более сложных подходов [11-13].

4. Перейдем к рассмотрению результатов самосогласованной теории для $d \geqslant 4$. Из (10) немедленно получаем

$$\sigma_E = \begin{cases} \dfrac{ne^2}{m}\tau\left[1-\left(\dfrac{E}{E_c}\right)^{\frac{d-4}{2}}\right] \underset{E\leqslant E_c}{\approx} \dfrac{ne^2}{m}\tau\left(\dfrac{d-4}{2}\right)\left(\dfrac{E_c-E}{E_c}\right); \quad d>4, \\ \dfrac{ne^2}{m}\tau\left[1-\left(\dfrac{m}{2\pi}\right)^2 x_0^2\rho V^2\right]; \quad d=4. \end{cases} \tag{20}$$

Результат (20) для $d>4$ явно нефизический: произошла инверсия области локализованных состояний и металлической области. Для $d=4$ имеем металлическую проводимость $m^2\rho V^2$ — безразмерная константа связи четырехмерной теории [15], и наше рассмотрение имеет смысл лишь при $m^2\rho V^2 \ll 1$. (Из (15) при этом следует $\omega_0^2 \in \operatorname{Im}$). Это ясно и из того, что величина E_{sc} (13) стремится к нулю при $d \to 4$ (снизу) при $m^2\rho V^2 \ll 1$. Инверсия металлической области и области локализованных состояний при $d>4$ является естественным следствием отмечавшегося ранее в [15, 16] факта: в рассматриваемой модели разложение теории возмущений идет по параметру $\left(\frac{E}{E_{sc}}\right)^{\frac{4-d}{2}}$, при $d<4$ разложение расходится при $E \to 0$, при $d>4$ — при $E \to \infty$. Нефизическое поведение при $d>4$ отражает неадекватность модели с точечным взаимодействием (корреляция случайного потенциала типа «белого шума») для $d>4$ [17]. Ситуация меняется, если считать, что параметр обрезания k_0 в (3) определяется не импульсом Ферми, а скажем радиусом действия потенциала (парного коррелятора случайных потенциалов) R_{int}, так что $k_0 \sim R_{\text{int}}^{-1} \ll p_F$ (дальнодействующее взаимодействие). При этом $d<4$ получаем те же результаты, что и выше, но порог подвижности определяется соотношением

$$E_c = \frac{d}{d-2}\left(\frac{m}{2\pi}\right)^{d/2}\frac{E^{d/2-1}}{\Gamma\left(\frac{d}{2}\right)}\rho V^2; \quad E_0 = \frac{k_0^2}{2m}. \tag{21}$$

Для $d \geqslant 4$ имеем

$$\sigma_E \infty \frac{ne^2}{m}\tau\frac{E-E_c}{E_c}, \quad E \geqslant E_c, \tag{22}$$

$$\omega_0^2 \infty \frac{4}{d}\frac{d-4}{d-2}\left(1-\frac{E}{E_c}\right). \tag{23}$$

Соответственно критический индекс радиуса локализации $\nu=1/2$ при $d>4$. В этом смысле можно говорить о $d=4$, как о верхней критической размерности для явления локализации [1]. Подчеркнем, однако, что выбор k_0, не зависящего от p_F, вообще говоря, не следует из рассматриваемой модели, которая приспособлена для рассмотрения области $d<4$. Это важное обстоятельство не обсуждается в работе [8].

5. В заключение приведем более подробные, чем в [3] результаты по частотной зависимости проводимости в самосогласованной теории для $d=2$. Как следует из несколько громоздкого, но прямого анализа уравнения (3) при $d=2$, можно выделить несколько интервалов частот, в которых поведение проводимости является существенно различным. Для предельно малых частот $\omega \ll \frac{1}{\lambda} e^{-1/\lambda}\cdot\frac{1}{\tau}$ мы имеем

$$\sigma_E(\omega) \approx \frac{ne^2}{m}\frac{1}{\tau\lambda}\frac{e^{2/\lambda}}{4(x_0E)^4}\omega^2, \tag{24}$$

т. е. «изоляторное» поведение [3]. При несколько больших частотах $\frac{1}{\lambda} e^{-1/\lambda} \frac{1}{\tau} \ll \omega \ll \frac{1}{\lambda^2} e^{-1/\lambda} \frac{1}{\tau}$

$$\sigma_E(\omega) \approx \frac{ne^2}{m} \frac{e^{1/\lambda}}{2(x_0 E)^2} \omega. \tag{25}$$

При дальнейшем повышении частоты, в интервале $\frac{1}{\lambda^2} e^{-1/\lambda} \frac{1}{\tau} \ll \omega \ll \frac{\lambda^2}{\tau}$ мы получаем «квазиметаллическое» поведение с логарифмическими поправками, найденное впервые в работе [7];

$$\sigma_E(\omega) = \frac{ne^2}{m} \tau \left(1 - \lambda \ln \frac{1}{\omega\tau}\right). \tag{26}$$

Наконец, для $\lambda^2/\tau \ll \omega \ll 1/\tau$ самосогласованная теория дает

$$\sigma_E(\omega) \approx \frac{ne^2}{m} \tau \left(1 - \frac{\tilde{E}_c}{E}\right), \tag{27}$$

где

$$\tilde{E}_c \approx \frac{m}{\pi} \rho V^2 \ln \frac{x_0}{2}. \tag{28}$$

Последний результат особенно интересен: видно, что в этом интервале частот проводимость практически имеет вид постоянной (независящей от ω) металлической проводимости с порогом подвижности $\tilde{E}_c$ (28). Возможно, что этот результат разъясняет известные противоречия между различными численными подходами к расчету двумерной проводимости [1]: логарифмические поправки и изоляторное поведение проявляются лишь при предельно малых частотах, наряду с этим существует (в меру малости λ) интервал частот, где в системе симулируется конечный порог подвижности.

Литература

[1] М. В. Садовский. УФН, *133*, 223, 1981.
[2] P. W. Anderson. Phys. Rev., *109*, 1492, 1958.
[3] D. Vollhardt, P. Wölfle. Phys. Rev., *B22*, 4666, 1980.
[4] D. Yoshioka, Y. Ono, H. Fukuyama. J. Phys. Sol. Jap., *50*, 3419, 1981.
[5] D. Yoshioka. J. Phys. Soc. Jap., *51*, 716, 1982.
[6] J. S. Langer, T. Neal. Phys. Rev. Lett., *16*, 984, 1966.
[7] Л. П. Горьков, А. И. Ларкин, Д. Е. Хмельницкий. Письма ЖЭТФ, *30*, 248, 1979.
[8] D. Vollhardt, P. Wolfle. Phys. Rev. Lett., *48*, 699, 1982.
[9] М. В. Садовский. ЖЭТФ, *83*, 1418, 1982.
[10] В. Л. Березинский, Л. П. Горьков. ЖЭТФ, *77*, 2498, 1979.
[11] F. Wegner. Zs. Phys., *B35*, 208, 1979.
[12] A. J. McKane, M. Stone. Ann. Phys., *131*, 36, 1981.
[13] S. Hikami. Phys. Rev., *B24*, 2671, 1981.
[14] B. Shapiro, E. Abrahams. Phys. Rev., *B24*, 4025, 1981.
[15] М. В. Садовский. ФТТ, *19*, 2334, 1977.
[16] S. F. Edwards, M. B. Green, G. Srinivasan. Phil. Mag., *35*, 1421 1977.
[17] D. J. Thouless. J. Phys., *C9*, L603, 1976.

Институт физики металлов
УНЦ АН СССР
Свердловск

Поступило в Редакцию
29 июня 1982 г.