АКАДЕМИЯ НАУК СССР • . УРАЛЬСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ • 1982

М. В. САДОВСКИЙ

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ И КРИТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ НА ПОРОГЕ ПОДВИЖНОСТИ

Представления о локализации электронов в неупорядоченных системах лежат в основе современной теории их электронных свойств [2, 3]. Однако полного понимания явлений, происходящих вблизи порога подвижности, еще нет, что связано с большой математической сложностью данной задачи. В последнее время наблюдается значительная активизация усилий в этой области как теоретиков, так и экспериментаторов [7]. Наметившийся прогресс связан главным образом с применением в теории локализации некоторых представлений и методов, заимствованных из современной теории критических явлений. Обзор соответствующих попыток проведен недавно в [7]. В данной статье мы остановимся в основном на наших исследованиях в этом направлении.

Нас будут интересовать основные характеристики электронных состояний вблизи порогов подвижности [2, 3], причем мы попытаемся провести их описание, исходя из определенной аналогии, которая существует между явлением локализации и фазовыми переходами [7]. В теории электронов в неупорядоченных системах существуют два взаимно дополнительных подхода, которые мы именуем подходами Андерсона и Эдвардса [7]. В первом из них локализация исследуется через свойства сходимости некоторого ряда теории возмущений для неусредненной функции Грина, во втором рассматриваются функции Грина, усредненные по ансамблю случайных конфигураций системы.

В рамках подхода Андерсона можно довольно просто получить скэйлинговое описание порога подвижности в смысле обычной теории критических явлений [4, 7]. Дело в том, что пространственное поведение андерсоновской (наиболее вероятной) функции Грина определяется статистикой путей без пересечений на рассматриваемой решетке, т. е. чисто геометрически [8, 9]. В то же время для статистики таких путей существует скэйлинговая теория [10]. Использование результатов этой теории в андерсоновском ряду теории возмущений приводит [4] к тому, что пространственное поведение андерсоновской функции Грина определяется пространственным поведением корреляционной функции обычной теории фазовых переходов [16] с числом компонент «параметра порядка» $n=0$. В частности, при этом получается типичное «критическое» поведение радиуса локализации электрона вблизи порога подвижности [4]:

$$R_{\mathrm{loc}} \sim a\left(\frac{W/V-(W/V)_c}{(W/V)_c}\right)^{-\nu}, \qquad (1)$$

где a — межатомное расстояние; W/V — отношение амплитуды беспорядка к интегралу переноса в модели Андерсона [8]; $(W/V)_c$ — критическое значение этого отношения, при котором происходит полная локализация всей зоны. В (1) ν — индекс корреляционной длины теории критических явлений с $n=0$ [10, 16], который может быть найден обычным образом в рамках ε-разложения [16], в частности, для $d=3$, $\nu\approx 0{,}59$. В общем случае $\nu<2/d$ (d — размерность пространства). Согласно Мотту [13], для существования скачка проводимости на пороге подвижности (т. е. для существования минимальной металлической проводимости [2, 3]) необходимо выполнение обратного неравенства $\nu>2/d$, поэтому полученный результат может означать непрерывное обращение проводимости в нуль на пороге подвижности.

К сожалению, андерсоновская функция Грина [4, 8, 9] не определяет таких физических величин как плотность состояний или проводимость [7], для нахождения которых следует обратиться к вычислению усредненных функций Грина (подход Эдвардса).

Рассмотрим известную модель электрона в гауссовом случайном поле, возникающую из обычной задачи об электроне в системе хаотически расположенных точечных рассеивателей в пределе $\rho\to\infty$, $V\to 0$, $\rho V^2\to \mathrm{const}$, где ρ — плотность рассеивателей, V — амплитуда рассеяния. Нетрудно переформулировать эту модель на языке, аналогичном теории критических явлений, или, точнее, неустойчивой теории поля определенного типа [4—6]. Оказывается, что усредненная функция Грина электрона в гауссовом случайном поле может быть определена как функция Грина скалярной теории поля с лагранжианом:

$$L=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\left\{\frac{1}{2m}(\nabla\Phi_j)^2-E'\Phi_j^2\right\}-\frac{1}{8}\rho V^2\left(\sum_{j=1}^{n}\Phi_j^2\right)^2;\ E'=E+i\delta. \tag{2}$$

Здесь m — масса электрона, E — его энергия. Число компонент поля $n\to 0$, что исключает «петлевые» графики, отсутствующие в диаграммной технике Эдвардса. В (2) уже нет случайных параметров — это «эффективный» лагранжиан, который сразу порождает диаграммную технику для усредненных функций Грина. Одноэлектронная функция Грина определяется при этом следующим функциональным интегралом:

$$G(r-r'\,|\,g=-\rho V^2)=-\frac{1}{Z}\lim_{n\to 0}\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\int\{\delta\Phi(r)\}\,\Phi_j(r)\,\Phi_j(r')\exp\{-S[\Phi]\}, \tag{3}$$

где

$$Z=\int\{\delta\Phi(r)\}\exp\{-S[\Phi]\}, \tag{4}$$

$S[\Phi]=\int d^d r L(r)$ — действие теории поля (2).

Функциональный интеграл (3) при формальном вычислении расходится в силу «неправильного» знака константы связи $g=-\rho V^2<0$ (притяжение!), что отражает известную неустойчивость основного состояния теории поля (2). Поэтому (3) следует понимать в смысле аналитического продолжения по константе связи от произвольных $g>0$ на $g=-\rho V^2<0$. Аналитические свойства функций Грина теории поля в комплексной плоскости константы связи определяются следующим дисперсионным соотношением по константе связи [11]:

$$G(g)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{0} dz\,\frac{\Delta(z)}{z-g}, \tag{5}$$

где

$$\Delta(g)=\frac{1}{2i}\left[G(g+i\varepsilon)-G(g-i\varepsilon)\right]=\operatorname{Im}G(g), \tag{6}$$

т. е. функция Грина аналитична по константе связи в комплексной плоскости с разрезом вдоль отрицательной части действительной оси, $\Delta(g)$ — скачок на разрезе (отличный от нуля при $g<0$), определяющий при таком подходе все основные свойства функций Грина.

Функциональный интеграл (3) можно рассмотреть методом перевала [11]. Для этого нужно рассмотреть классические полевые уравнения, соответствующие лагранжиану (2):

$$\frac{1}{2m}\,\Delta\Phi_j=-E\Phi_j-\frac{1}{2}\,\rho V^2\Phi_j\left(\sum_{j=1}^{n}\Phi_j^2\right). \tag{7}$$

В методе перевала интересны решения (7) с конечным действием (4) (инстантоны). В данной задаче существенны сферически-симметричные решения (7) вида

$$\Phi_j(r)=\Phi_0(r)\,u_j. \tag{8}$$

Здесь $u^2=1$ — единичный вектор в пространстве «изоспина» $0(n)$ симметрийной теории (2). В такой модели решения $\Phi_0(r)$ с конечным действием существуют для $d<4$ при $E<0$ [6], причем из анализа размерностей видно, что $\Phi_0(r)=(2|E|/\rho V^2)^{1/2}x(t)$, $t=(2m|E|)^{-1/2}r$, $x(t)$ — безразмерна. При $E>0$ имеется только тривиальное решение с «конечным» (равным нулю) действием $\Phi_0(r)\equiv 0$. Поэтому перевальный метод расчета (3) сводится в этом случае к простой теории возмущений. В пространстве с размерностью $d=4-\varepsilon$ существует доминирующая последовательность диаграмм («паркет»). Анализируя задачу в этом приближении, получаем [5], что из-за «неправильного» знака константы связи эффективное взаимодействие (вершинная часть) в рассматриваемой теории имеет ложный полюс, соответствующий неприменимости теории возмущений в области энергий:

$$E \lesssim E_{sc}=\frac{1}{2\,ma^2}\left(\frac{u}{4-d}\right)^{2/4-d}, \tag{9}$$

где $u=m^2/2\pi^2\rho V^2a^{4-d}$ — безразмерная константа взаимодействия. Величина E_{sc} — точный аналог «гинзбурговской» критической области теории критических явлений [5, 16]. Однако в отличие от этой теории при переходе в область $E\lesssim E_{sc}$ происходит не ослабление [16], а усиление эффективного взаимодействия. Параметр теории возмущений — безразмерное отношение $(E/E_{sc})^{d-4/2}$, при $E\to 0$ теория возмущений неприменима, а ее формальное использование приводит к нефизическим результатам [5].

В области $E<0$ нелинейные решения (8) (инстантоны) приводят к существенному изменению структуры теории. Их присутствие при вычислении (3) определяет появление вкладов, неаналитичных по константе связи:

$$\exp\{-S[\Phi_0]\}=\exp\left\{-A_d\frac{m^{-d/2}}{\rho V^2}|E|^{2-d/2}\right\}, \qquad (10)$$

которые, в частности, определяют поведение «хвоста» плотности электронных состояний, возникающего за счет появления локализованных состояний во флуктуациях гауссова случайного поля [6].

В работе [6] предложен метод вычисления предэкспоненты в плотности состояний, основанный на использовании дисперсионного соотношения по константе связи (5) и соответствии с теорией критических явлений при $g>0$. Для $d=1$ результат такого вычисления совпадает с известными точными решениями. Критерий применимости соответствующих выражений — большая величина показателя экспоненты в (10), что сводится опять к $|E|\gg E_{sc}$ [5, 6]. «Гинзбурговская» критическая область возникает и со стороны отрицательных энергий, где электроны локализованы.

Область энергий $|E|<E_{sc}$ представляет основной интерес с точки зрения скэйлинговой теории локализации (здесь находятся пороги подвижности). В работе [6] была высказана гипотеза о возможности обычного скэйлингового поведения в этой области энергий (несмотря на «неправильный» знак константы связи), основанная на универсальности скачка на разрезе в дисперсионном соотношении (5). Одна и та же функция $\Delta(z, E)$ определяет поведение коррелятора в задаче об электроне в случайном поле ($g<0$ в (5)) и обычное (при $|E|<E_{sc}$) скэйлинговое поведение коррелятора в теории критических явлений ($g>0$ в (5)) [16]. Тогда можно предположить, что (в импульсном представлении) скачок на разрезе в (5), при $|E|\ll E_{sc}$ имеет вид

$$\operatorname{Im} G(Ep|-\rho V^2)\approx \mathrm{const}\,|E|^{-\gamma}D(p^2\xi^2), \qquad (11)$$

где γ — обычный критический индекс восприимчивости, а корреляционная длина

$$\xi\sim \mathrm{const}\, a\,|E/E_{sc}|^{-\nu}. \qquad (12)$$

При $E<0$ ξ совпадает с радиусом локализации, при $E>0$ физический смысл ξ менее ясен (см., однако, [12]). Индексы γ и ν совпадают с индексами обычной теории критических явлений [16] с $n=0$. Из (11) следует, что электронная плотность состояний на пороге подвижности имеет слабый излом [6]:

$$N(E)\sim\{\mathrm{const}+|E|^{1-\alpha}\} \qquad (13)$$

($\alpha=2-d\nu$ — критический индекс теплоемкости [16]). Производная плотности состояний имеет особенность как в теплоемкости в теории критических явлений [16].

Может показаться, что поведение типа (11) противоречит обычному дисперсионному соотношению для одноэлектронной запаздывающей функции Грина $G^R(Ep)$:

$$\operatorname{Re} G^R(Ep)=\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\operatorname{Im} G^R(E'p)}{E'-E}\,dE', \qquad (14)$$

так как при подстановке (11) в (14) сходимость интеграла (14) обеспечивается только при выполнении неравенства $0<\gamma<1$ [15], тогда как из

[16] (даже при $n=0$) следует $1<\gamma<2$. Однако это не так, поскольку (как это обычно делается при возникновении проблем со сходимостью интегралов в дисперсионных соотношениях) можно написать (14) не для $G^R(Ep)$, а для $EG^R(Ep)$ (которая также, очевидно, аналитична в верхней полуплоскости E). Тогда проблема снимается, интеграл, как легко видеть, сходится в нуле при $1<\gamma<2$. Поэтому неравенство на индекс γ, указанное в [15], фактически не может быть доказано на основе аналитических свойств функций Грина.

Локализацию нельзя изучать, основываясь на одночастичной усредненной функции Грина. Кинетические свойства (проводимость) определяются усредненными двухчастичными функциями Грина. Для их вычисления вместо (2) следует рассмотреть [7] иной эффективный лагранжиан двух взаимодействующих нуль-компонентных полей:

$$L=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\left\{\frac{1}{2m}(\nabla\Phi_j)^2-E'\Phi_j^2\right\}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\left\{\frac{1}{2m}(\nabla\varphi_i)^2-\right.$$

$$\left.-E''\varphi_i^2\right\}-\frac{\omega}{4}\left\{\sum_{j=1}^{n}\Phi_j^2-\sum_{i=1}^{m}\varphi_i^2\right\}-\frac{1}{8}\rho V^2\left\{\left(\sum_{j=1}^{n}\Phi_j^2+\sum_{i=1}^{m}\varphi_i^2\right)\right\}^2;$$

$$E'=E+i\delta,\ E''=E-i\delta, \tag{15}$$

где ω — частота внешнего поля (речь идет о вычислении проводимости $\sigma(\omega)$). Этот лагранжиан порождает при $n\to 0$, $m\to 0$ последовательность диаграмм, определяющих проводимость в подходе Эдвардса.

Использование теории возмущений, однако, и тут приводит к таким же нефизическим особенностям в вершинных частях, как и в более простой задаче (2), что опять указывает на неприменимость теории возмущений в окрестности порога подвижности. В области $E<0$ снова существенны решения инстантонного типа, а метод перевала «работает» только при $|E|\gg E_{sc}$. Окрестность порога подвижности $|E|\lesssim E_{sc}$ оказывается недоступной для современных методов.

Предположим, однако, следуя [6], что в этой области реализуется обычное скэйлинговое поведение теории критических явлений, так что при

$$\operatorname{Re}G(Ep)\sim\operatorname{Im}G(Ep)\sim\frac{1}{E_{sc}}(pa)^{\eta-2}F(p^2\xi^2), \tag{16}$$

где $\eta=2-\gamma/\nu$ [16], а для $F(x)$ предполагаются асимптотики

$$F(x)\sim x^{(2-\eta)/2},\ x\to 0;\ F(x)\sim 1,\ x\to\infty. \tag{17}$$

Тогда для оценки проводимости в скэйлинговой области мы можем провести простой размерный анализ, подобный тому, который использовался (в другой задаче) в работе [1] Имеем

$$\sigma(\omega)=\frac{1}{i\omega}\{P^R(\omega)-P^R(0)\}, \tag{18}$$

где

$$P^R(\omega)-\underset{\omega\to 0}{P^R}(0)\sim e^2\int_{E_F}^{E_F+\omega}\frac{dE}{2\pi}\int\frac{d^dp}{(2\pi)^d}G(Ep)G(E+\omega p)\left(\frac{\partial G^{-1}(Ep)}{\partial p_i}\right)^2. \tag{19}$$

Для размерной оценки токовой вершины здесь применено тождество Уорда, кроме того, использовано обычное в скэйлинговой области (и в «паркете») пересуммирование графиков с «одеванием» обеих вершин в петле, определяющей проводимость (точнее величину $P^R(\omega) - P^R(0)$ (18)). Тогда из (16)—(19) получаем (восстанавливая $\hbar$, выше $\hbar=1$)

$$\sigma \sim \mathrm{const}\,\frac{e^2}{\hbar a^{d-2}}\left(\frac{E_F}{E_{sc}}\right)^{(d-2)\nu} \tag{20}$$

при $\omega \to 0$, $E_F > 0$. При $E_F = 0$ (т. е. уровне Ферми, лежащем на самом пороге подвижности), проводя в (19) соответствующее разложение в ряд по ω, получим

$$\mathrm{Re}\,\sigma(\omega) \sim \mathrm{Im}\,\sigma(\omega) \sim \mathrm{const}\,\frac{e^2}{\hbar a^{d-2}}\left(\frac{\omega}{E_{sc}}\right)^{(d-2)\nu}, \tag{21}$$

$\sigma(\omega) \to 0$ при $\omega \to 0$. При $E_F < 0$ из аналогичного рассмотрения следует $\sigma(\omega) \sim \omega^2$. Формулы типа (20)—(21) впервые были получены Вегнером [14], исходя из совершенно других соображений, вне связи с моделью $g\Phi^4$ (15). Наше рассмотрение сразу же дает и значения критических индексов, поскольку при «правильном» знаке констант связи (отталкивание) в (15) для $n \to 0$, $m \to 0$ из теории критических явлений следуют обычные значения критических индексов задачи (2) с $n=0$. Величина $\mathrm{const}\,\frac{e^2}{\hbar a^{d-2}}$ в (20), (21) представляет собой моттовскую «минимальную металлическую проводимость», которая при этом сохраняет смысл характерного масштаба проводимости в окрестности порога подвижности [7]. При $d>2$ проводимость непрерывно обращается в нуль на пороге подвижности (20). Случай $d=2$ требует специального рассмотрения [7].

Проведенный размерный анализ привлекателен как метод быстрого получения качественных результатов. Однако следует помнить, что гипотеза скэйлинга на пороге подвижности, аналогичного обычному скэйлингу теории критических явлений, остается недостаточно обоснованной. Обсуждавшиеся выше трудности носят принципиальный характер и показывают, что рассматриваемая проблема существенно более сложная, чем проблема критических явлений [7]. Вместе с тем простые оценки типа (20), (21) могут сохраниться и в будущей последовательной теории.

ЛИТЕРАТУРА

1. Абрикосов А. А., Бенеславский С. Д. О возможности существования веществ, промежуточных между металлами и диэлектриками.— Ж. эксперим. и теор. физ., 1970, т. 59, с. 1280—1298.
2. Мотт Н. Переходы металл-изолятор. М.: Наука, 1979. 342 с.
3. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1974. 472 с.
4. Садовский М. В. Локализация электронов в неупорядоченных системах: порог подвижности и теория критических явлений.— Ж. эксперим. и теор. физ., 1976, т. 70, с. 1936—1940.
5. Садовский М. В. Электрон в случайном поле в пространстве с размерностью $d=4-\varepsilon$.— Физ. тв. тела, 1977, т. 19, с. 1334—1337.
6. Садовский М. В. Электрон в случайном поле, теория фазовых переходов и нелинейные решения с конечным действием.— Там же, 1979, т. 21, с. 743—751.
7. Садовский М. В. Локализация электронов в неупорядоченных системах: критическое поведение и макроскопические проявления.— Усп. физ. наук, 1981, т. 133, с. 223—257.
8. Anderson P. W. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices.— Phys. Rev., 1958, v. 109, p. 1492—1505.

9. Anderson P. W. The Size of Localized States Near the Mobility Edge.— Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1972, v. 60, p. 1097—1099.
10. Cloizeaux J. Lagrangian Theory for a Repulsive Random Chain.— Phys. Rev., 1974, v. A10, p. 1665—1669.
11. Dorfel B., Kazakov B., Shirkov D. The Universality of Coupling Constant Singularity in QFT.— JINR-Preprint E2-10720, 1977. 12 p.
12. Imry Y. Possible Role of Incipient Anderson Localization in the Resistivities of Highly Disordered Metals.— Phys. Rev. Lett., 1980, v. 44, p. 469—472.
13. Mott N. F. Some Properties of the Mobility Edge in Disordered Systems.— Comm. Phys., 1976, v. 1, p. 203—206.
14. Wegner F. J. Electrons in Disordered Systems. Scaling Near the Mobility Edge.— Zs. Phys., 1976, v. B25, p. 327—337.
15. Wegner F. J. Inequality for the Mobility Edge Behaviour.— J. Phys., 1980, v. C13, p. L45—L46.
16. Wilson K. G. Renormalization Group and ε-expansion.— J. Kogut.—Phys. Reports., 1974, v. 12, p. 75—200.