

## САМОСОГЛАСОВАННАЯ ТЕОРИЯ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ–ДИЭЛЕКТРИК В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, В. Г. Суворов, М. А. Эржабаев

*Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук  
620219, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 28 ноября 1994 г.

Самосогласованная теория локализации электронов в неупорядоченных системах обобщается в направлении учета межэлектронного взаимодействия. Предложено несколько вариантов самосогласования, учитывающих низшие порядки теории возмущений по взаимодействию, и приведено их критическое сравнение. В зависимости от принимаемой схемы можно получить как непрерывный переход металл–диэлектрик, так и переход с минимальной металлической проводимостью. В схеме с непрерывным переходом рассчитана частотная зависимость обобщенного коэффициента диффузии как в металлической, так и в диэлектрической фазах. Рассчитана перенормировка плотности состояний за счет взаимодействия, демонстрирующая образование эффективной щели при переходе от металла к диэлектрику.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема перехода металл–диэлектрик, вызванного разупорядочением, относится к числу наиболее фундаментальных задач теории конденсированного состояния [1, 2]. Наиболее существенные трудности здесь связаны с последовательным учетом межэлектронного взаимодействия, важнейшая роль которого уже довольно давно продемонстрирована даже в случае слабонеупорядоченных металлов [3]. В последние годы возникло целое направление исследований этой проблемы в рамках ренормгруппового подхода [1, 2, 4], обобщающего обычную скэйлинговую теорию локализации [1]. При всех несомненных успехах этого подхода задача еще далека от решения, в особенности в части предсказания конкретных экспериментально проверяемых зависимостей физических величин. Ренормгрупповой (скэйлинговый) подход вообще приспособлен лишь для анализа непосредственной окрестности перехода [2], тогда как в эксперименте речь обычно идет об изменении физических свойств в широком интервале параметров, контролирующих переход. В частности, до настоящего времени отсутствуют работы, в которых ренормгрупповой подход удалось бы применить к описанию свойств диэлектрической фазы.

В теории перехода металл–диэлектрик, не учитывающей межэлектронного взаимодействия, наряду со скэйлинговым подходом [1] уже довольно давно используется так называемая самосогласованная теория локализации [5–7], которая представляет собой удачную интерполяционную схему, позволяющую провести расчет основных физических величин в широкой области изменения параметров, от слабонеупорядоченного металла до андерсоновского диэлектрика. При этом теория воспроизводит и все основные результаты скэйлингового подхода [5, 6]. Хотя строгое диаграммное обоснование самосогласованного подхода отсутствует, теория находится в количественном согласии

с результатами точного численного моделирования перехода Андерсона [8, 9]. Первые попытки в направлении учета поправок от межэлектронного взаимодействия в самосогласованной теории локализации были предприняты в работах [10, 11] (см. также [6]).

В настоящей работе предпринимается попытка построения самосогласованной теории перехода металл-диэлектрик, учитывающей эффекты межэлектронного взаимодействия в первом порядке теории возмущений. При этом, в отличие от работ [10, 11], мы учтем влияние взаимодействия на обобщенный коэффициент диффузии, являющийся основной величиной, подлежащей самосогласованному определению. К сожалению, рассматриваемый подход отличается некоторой неоднозначностью, и можно предложить несколько схем самосогласования, ведущих к различным физическим результатам. Выбор между предлагаемыми схемами, по-видимому, можно осуществить из соображений наилучшего соответствия эксперименту. В частности, в зависимости от принимаемой схемы можно получить как непрерывный переход металл-диэлектрик, так и переход с минимальной металлической проводимостью. Известно, что современные эксперименты свидетельствуют в пользу картины непрерывного перехода [1, 2]. В рамках такой схемы мы проведем расчет частотной зависимости обобщенного коэффициента диффузии, а также перенормировки одночастичной (туннельной) плотности состояний за счет взаимодействия при переходе от металла к диэлектрику.

## 2. ПОПРАВКИ ОТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ К ПРОВОДИМОСТИ ВБЛИЗИ ПЕРЕХОДА АНДЕРСОНА

Введем двухчастичную функцию Грина электрона в случайном поле примесей [5]:

$$\Phi_{pp'}^{RA}(\mathbf{q}, \omega, \varepsilon) = \langle G^R(\mathbf{p}_+, \mathbf{p}'_+, \varepsilon + \omega) G^A(\mathbf{p}_-, \mathbf{p}'_-, \varepsilon) \rangle, \quad (1)$$

где  $\mathbf{p}_{\pm} = \mathbf{p} \pm \mathbf{q}/2$ ,  $\langle \dots \rangle$  — усреднение по случайному потенциалу. Введем также соответствующие ей полную вершинную часть  $\Gamma_{pp'}^{RA}(\mathbf{q}, \omega)$  и «треугольную» вершину  $\gamma^{RA}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega)$  (см. рис. 1)

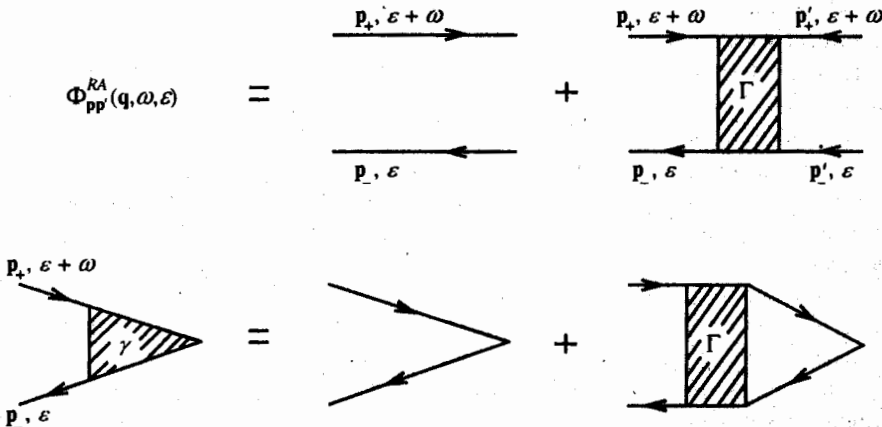


Рис. 1. Двухчастичная примесная функция Грина  $\Phi_{pp'}^{RA}(\mathbf{q}, \omega, \varepsilon)$  и соответствующие ей вершины  $\gamma^{RA}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega)$  и  $\Gamma_{pp'}^{RA}(\mathbf{q}, \omega)$

В самосогласованной теории локализации вершинная часть и треугольная вершина имеют следующий вид [6]:

$$\Gamma_{pp'}^{RA}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\gamma\rho U^2}{-i\omega + D(\omega)q^2}, \quad (2)$$

$$\gamma^{RA}(\mathbf{p}, \mathbf{q}, \omega) = \frac{2\gamma}{-i\omega + D(\omega)q^2}, \quad (3)$$

где  $\gamma = 1/2\tau = \pi\rho U^2 N_0(0)$  — борновское затухание,  $\rho$  — концентрация примесей,  $U$  — их потенциал,  $N_0(0)$  — плотность состояний невзаимодействующих электронов на уровне Ферми,  $D(\omega)$  — обобщенный коэффициент диффузии.

Вид соответствующих вершин совпадает с полученным в лестничном приближении с учетом замены обычного друдевского коэффициента диффузии  $D_0$  на частотно-зависимый обобщенный коэффициент диффузии  $D(\omega)$ , который определяется уравнением [5, 7]

$$\frac{D_0}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \sum_{|q| < k_0} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2}, \quad (4)$$

где  $k_0 = \min\{l^{-1}, k_F\}$  — импульс обрезания,  $l$  — длина свободного пробега,  $k_F$  — импульс Ферми.

В трехмерной системе обобщенный коэффициент диффузии в самосогласованной теории локализации имеет следующий вид:

$$\frac{D_s(\omega)}{D_0} = \begin{cases} \frac{3\pi\lambda}{2} \left(\frac{\omega_c}{E_F}\right)^{1/3} = \alpha, & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha > 0 \text{ (металл)}, \\ \frac{3\pi\lambda}{2} \left(\frac{-i\omega}{E_F}\right)^{1/3}, & \omega \gg \omega_c \text{ (металл и диэлектрик)}, \\ \frac{3\pi\lambda}{2} \left(\frac{\omega_c}{E_F}\right)^{-2/3} \left(\frac{-i\omega}{E_F}\right), & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha < 0 \text{ (диэлектрик)}, \end{cases} \quad (5)$$

где  $\lambda = \gamma/\pi E_F$  — безразмерный параметр беспорядка,  $E_F$  — энергия Ферми,  $\omega_c = (2|\alpha|/3\pi\lambda)^3 E_F$  — характерная частота,  $\alpha = 1 - 3\lambda x_0$  — параметр, контролирующий переход от металла к диэлектрику,  $x_0 = k_0/k_F$  — параметр обрезания.

В пренебрежении локализационными вкладами поправки к проводимости первого порядка по кулоновскому взаимодействию определяются диаграммами, представленными на рис. 2 [12]. В работе [12] было показано, что суммарный вклад диаграмм  $a$ ,  $b$  и  $v$  равен нулю и поправка к проводимости определяется лишь диаграммами  $g$  и  $d$ . При этом мы пренебрегаем так называемыми хартриевскими вкладами в проводимость [3, 12], что справедливо в пределе  $2k_F/\kappa \gg 1$ , где  $\kappa$  — обратный радиус дебаевской экранировки. Последнее справедливо, строго говоря, для случая систем с низкой электронной плотностью, которые наиболее интересны с точки зрения экспериментов по переходу металл-диэлектрик. Ввиду известной расходимости радиуса экранирования в точке андерсоновского перехода [6] это приближение, по-видимому, тем лучше, чем ближе к

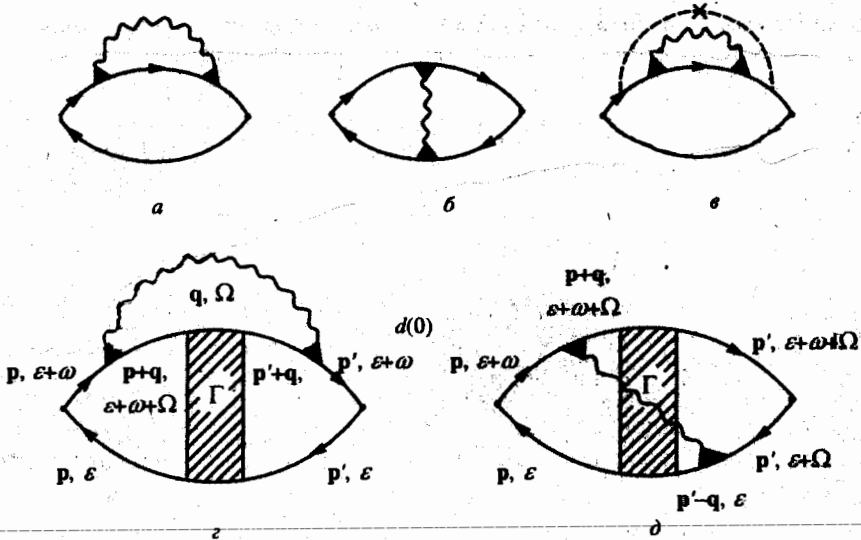


Рис. 2. Поправки к проводимости в первом порядке по взаимодействию

переходу находится система. Используемую нами модель «точечного» взаимодействия нужно понимать с этой оговоркой.

Воспользовавшись видом примесных вершин (2) и (3), для поправки к проводимости за счет взаимодействия получаем (ср. [12])

$$\delta\sigma(\omega) = \frac{32i}{\pi d} e^2 N_0(0) D_0^2 \int_{\omega}^{\infty} \frac{d\Omega}{2\pi} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{V(q\Omega)q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}. \quad (6)$$

Здесь  $e$  — заряд электрона,  $d$  — размерность системы,  $V(q\Omega)$  — взаимодействие. Для простоты в дальнейшем мы будем рассматривать в основном точечное взаимодействие  $V(q\Omega) = V_0$ . В случае динамически экранированного кулоновского взаимодействия имеем при малых  $q$  и  $\Omega$  [3]

$$V(q\Omega) = \frac{1}{2N_0(0)} \frac{-i\Omega + D(\Omega)q^2}{D(\Omega)q^2}. \quad (7)$$

Для поправки к коэффициенту диффузии от точечного взаимодействия получаем

$$\begin{aligned} \frac{\delta D_C(\omega)}{D_0} &= \frac{\delta\sigma(\omega)}{2e^2 N_0(0) D_0} = \\ &= \frac{8i}{\pi d} \frac{\mu D_0}{\pi N_0(0)} \int_{\omega}^{\infty} d\Omega \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}, \quad (8) \end{aligned}$$

где  $\mu = V_0 N_0(0)$ . Используя в (8) выражение для коэффициента диффузии, получаемое в самосогласованной теории локализации (5), для трехмерной системы имеем

$$\frac{\delta D_{Cs}(\omega)}{D_0} = -\frac{2\mu}{3\pi\lambda} \begin{cases} \frac{3\sqrt{3} + 2\sqrt{2}}{2\pi} \left(\frac{E_F}{\omega_c}\right)^{1/3}, & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha > 0 \quad (\text{металл}), \\ \frac{3}{\pi} \left(\frac{E_F}{-i\omega}\right)^{1/3}, & \omega \gg \omega_c \quad (\text{металл и диэлектрик}), \\ \frac{1}{\pi} \left(\frac{\omega_c}{E_F}\right)^{5/3} \left(\frac{E_F}{-i\omega}\right)^2, & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha < 0 \quad (\text{диэлектрик}). \end{cases} \quad (9)$$

Легко видеть, что поправка к коэффициенту диффузии (к проводимости) расходится при подходе к переходу Андерсона из металлической фазы ( $\omega_c \rightarrow 0$ ), а в диэлектрической фазе возникает расходимость при  $\omega \rightarrow 0$ .

Если вместо точечного взаимодействия берется динамически экранированное кулоновское взаимодействие вида (7), то поправка к коэффициенту диффузии принимает вид:

$$\frac{\delta D_C(\omega)}{D_0} = \frac{4i\lambda}{\pi} \frac{D_0^2}{k_F} \int_{\omega}^{\infty} d\Omega \int_0^{k_0} \frac{dq q^{d-1}}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2] D(\Omega)}. \quad (10)$$

Используя для коэффициента диффузии вид, получаемый в самосогласованной теории локализации (5), для поправки получаем выражение (9), в котором  $\mu = 1/3$ . Использование динамически экранированного кулоновского взаимодействия вместо точечного приводит лишь к тому, что  $\mu$  становится порядка единицы, поэтому в дальнейшем в основном будем рассматривать случай точечного взаимодействия.

Таким образом, поправка к коэффициенту диффузии вблизи перехода Андерсона начинает существенно превосходить коэффициент диффузии, получаемый из обычной самосогласованной теории локализации. Это вызывает необходимость построения новой схемы самосогласования, которая учитывала бы с самого начала межэлектронное взаимодействие.

### 3. СХЕМЫ САМОСОГЛАСОВАНИЯ

Напомним сначала схему обычной самосогласованной теории локализации в отсутствие кулоновского взаимодействия [5–7].

При слабом беспорядке проводимость определяется друдевским коэффициентом диффузии  $D_0$ . Суммирование последовательности «максимально перекрещивающихся» графиков приводит к следующей локализационной поправке к коэффициенту диффузии [5]:

$$\frac{\delta D(\omega)}{D_0} = -\frac{1}{\pi N_0(0)} \sum_{|q| < k_0} \frac{1}{-i\omega + D_0 q^2}. \quad (11)$$

Введем так называемое релаксационное ядро  $M(\omega)$ , связанное с обобщенным коэффициентом диффузии следующим соотношением [5]:

$$M(\omega) = \frac{2iE_F}{dm} \frac{1}{D(\omega)}. \quad (12)$$

В частности, друдевское релаксационное ядро

$$M_0 = \frac{2iE_F}{dm} \frac{1}{D_0} = 2i\gamma.$$

Поправка к релаксационному ядру непосредственно выражается через поправку к коэффициенту диффузии:

$$\delta M(\omega) = -\frac{2iE_F}{dm} \frac{\delta D(\omega)}{D^2(\omega)} = -\frac{M(\omega)}{D(\omega)} \delta D(\omega). \quad (13)$$

Рассмотрим в качестве нулевого приближения друдевский металл, тогда

$$\delta M(\omega) = -\frac{M_0}{D_0} \delta D(\omega). \quad (14)$$

Заменяв в диффузионном полюсе выражения (11) друдевский коэффициент диффузии  $D_0$  на обобщенный  $D(\omega)$  и подставив в выражение (14), мы получаем основное уравнение самосогласованной теории локализации:

$$M(\omega) = M_0 + \delta M(\omega) = M_0 \left( 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \sum_{|q| < k_0} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} \right), \quad (15)$$

которое совпадает с (5), если учесть, что  $M(\omega)/M_0 = D_0/D(\omega)$ .

Добавим теперь в систему кулоновское взаимодействие, поправки первого порядка от которого определяются диаграммами  $\varepsilon$  и  $\delta$  на рис. 2. К сожалению мы не можем предложить однозначной схемы самосогласования с учетом поправок от межэлектронного взаимодействия. Можно рассмотреть несколько альтернативных вариантов такой схемы, выбор между ними будет осуществляться исходя из дополнительных соображений качественного характера.

**Вариант I.** Будем действовать так же, как в обычной самосогласованной теории локализации. В качестве нулевого приближения выбираем друдевский металл и рассматриваем локализационные и кулоновские поправки на равных правах, проводя самосогласование в терминах релаксационного ядра. Релаксационное ядро в этом случае имеет вид

$$M(\omega) = M_0 + \delta M(\omega), \quad (16)$$

где

$$\delta M(\omega) = \delta M_I(\omega) + \delta M_C(\omega) = -\frac{M_0}{D_0} [\delta D_I(\omega) + \delta D_C(\omega)].$$

Здесь локализационная поправка  $D_I(\omega)$  к коэффициенту диффузии определяется выражением (11), а кулоновская поправка  $D_C(\omega)$  определяется выражением (8). Процедура самосогласования сводится к замене  $D_0$  на обобщенный коэффициент диффузии во всех диффузионных полюсах. В результате для обобщенного коэффициента диффузии получаем следующее интегральное уравнение:

$$\frac{D_0}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} - \frac{8i}{\pi d} \frac{\mu D_0}{\pi N_0(0)} \int_0^\infty d\Omega \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}. \quad (17)$$

**Вариант II.** В качестве нулевого приближения рассмотрим «грязный» металл, описываемый обычной самосогласованной теорией локализации, и добавим слабое кулоновское взаимодействие. Самосогласование опять проводим, рассмотрев поправки к релаксационному ядру.

Обычная самосогласованная теория описывается уравнением (15). В правую часть этого уравнения мы должны добавить кулоновскую поправку  $\delta M_C(\omega)$  к релаксационному ядру. Эта поправка имеет в данном случае вид

$$\delta M_C(\omega) = -\frac{M_s(\omega)}{D_s(\omega)} \delta D_C(\omega), \quad (18)$$

где  $M_s(\omega)$  и  $D_s(\omega)$  — релаксационное ядро и коэффициент диффузии, получаемые в обычной самосогласованной теории локализации (5). В этом случае уравнение для коэффициента диффузии принимает вид

$$\frac{D_0}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} - \left[ \frac{D_0}{D_s(\omega)} \right]^2 \times \frac{8i}{\pi d} \frac{\mu D_0}{\pi N_0(0)} \int_0^\infty d\Omega \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}. \quad (19)$$

**Вариант III.** В отличие от варианта II кулоновскую поправку  $\delta M_C(\omega)$  к релаксационному ядру, добавляемую в правую часть уравнения самосогласования (15), рассчитываем также самосогласованным образом:

$$\delta M_C(\omega) = -\frac{M(\omega)}{D(\omega)} \delta D_C(\omega). \quad (20)$$

Уравнение для коэффициента диффузии в этом случае принимает вид

$$\frac{D_0}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} - \left[ \frac{D_0}{D(\omega)} \right]^2 \times \frac{8i}{\pi d} \frac{\mu D_0}{\pi N_0(0)} \int_0^\infty d\Omega \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}. \quad (21)$$

**Вариант IV.** В качестве нулевого приближения опять возьмем обычную самосогласованную теорию локализации, однако самосогласование будем проводить, рассматривая поправки к коэффициенту диффузии, а не к релаксационному ядру.

Самосогласованное уравнение (4) мы можем переписать следующим образом:

$$\frac{D(\omega)}{D_0} = \left[ 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} \right]^{-1}. \quad (22)$$

Добавим теперь в правую часть кулоновскую поправку к коэффициенту диффузии (8) и получим следующее уравнение для коэффициента диффузии:

$$\frac{D(\omega)}{D_0} = \left[ 1 + \frac{1}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{-i\omega + D(\omega)q^2} \right]^{-1} + \frac{8i \cdot \mu D_0}{\pi d \pi N_0(0)} \int_0^\infty d\Omega \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{q^2}{[-i(\Omega + \omega) + D(\Omega + \omega)q^2] [-i\Omega + D(\Omega)q^2]^2}. \quad (23)$$

Выбор между альтернативными вариантами I–IV вряд ли возможен из общих соображений. Поэтому перейдем к анализу качественных следствий из этих уравнений.

#### 4. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ РАЗЛИЧНЫХ ВАРИАНТОВ САМОСОГЛАСОВАНИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ

В дальнейшем рассмотрим только трехмерные системы. В самосогласованной теории локализации коэффициент диффузии определяется выражением (5). Отсюда легко найти релаксационное ядро:

$$\frac{M_s(\omega)}{M_0} = \frac{D_0}{D_s(\omega)}. \quad (24)$$

Рассмотрим поправку к релаксационному ядру от межэлектронного взаимодействия, которая определяется следующим выражением:

$$\frac{\delta M_0(\omega)}{M_0} = -\frac{\delta D_C(\omega)}{D_0}. \quad (25)$$

(В качестве нулевого приближения здесь фигурирует «древесный» металл.)

Кулоновская поправка к коэффициенту диффузии в обычной самосогласованной теории локализации определяется выражением (9), подставив которое в (25), получаем соответствующую поправку  $\delta M_{0s}(\omega)$  к релаксационному ядру.

Сравнивая  $\delta M_{0s}(\omega)$  с  $M_s(\omega)$ , нетрудно убедиться, что в металлической фазе во всей области частот имеет место следующая качественная оценка:

$$\delta M_{0s}(\omega) \approx c\mu M_s(\omega), \quad (26)$$

где  $c$  — численный коэффициент порядка единицы

Как показывает детальный анализ, такая же оценка в металлической фазе сохраняется и для самосогласованного с учетом кулоновского взаимодействия релаксационного ядра во всех схемах самосогласования. Дело в том, что во всех схемах в металлической фазе частотное поведение коэффициента диффузии имеет вид, похожий на обычную самосогласованную теорию локализации — константа при малых частотах и  $D(\omega) \sim (-i\omega)^{1/3}$  при больших. Поэтому вместо (26) мы можем записать

$$\delta M_0(\omega) \approx c\mu M(\omega). \quad (27)$$

Пользуясь выражением (27), посмотрим, к каким качественным результатам в металлической фазе при  $\omega = 0$  приводят различные схемы самосогласования, предложенные выше.



**Вариант I.** Мы рассматриваем металлическую фазу, поэтому при  $\omega = 0$  имеем  $D(\omega = 0) = D \neq 0$ . Домножая уравнение (17) на  $M_0$ , получаем

$$M = M_0 + \frac{M_0}{\pi N_0(0)} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{Dq^2} + \delta M_0(0).$$

Воспользовавшись (27), получаем

$$M = M_0 + 3\lambda x_0 M + c\mu M.$$

Отсюда  $M = M_0/(1 - 3\lambda x_0 - c\mu)$ , или

$$\frac{D}{D_0} = 1 - 3\lambda x_0 - c\mu = \alpha - \alpha^*, \quad (28)$$

где  $\alpha^* = c\mu$ .

Итак, в присутствии слабого кулоновского взаимодействия андерсоновский переход сохраняется, показатель перехода остается прежним,  $\nu = 1$  (т. е., коэффициент диффузии обращается в нуль линейно по параметру беспорядка  $\alpha - \alpha^*$ ), наблюдается лишь смещение перехода в область более слабого беспорядка,  $\alpha = \alpha^*$ . Зависимость коэффициента диффузии от беспорядка приведена на рис. 3а.

Заметим, что анализ уравнения (17) в предположении обобщенного коэффициента диффузии, не зависящего от частоты, дает переход с минимальной металлической проводимостью.

**Вариант II.** Домножив уравнение (19) на  $M_0$  и воспользовавшись (27), получаем

$$M = M_0 + 3\lambda x_0 M + \frac{1}{\alpha^2} c\mu M.$$

Отсюда  $M = M_0/(\alpha - c\mu/\alpha^2)$ , или

$$\frac{D}{D_0} = \alpha - \frac{c\mu}{\alpha^2}. \quad (29)$$

В этом случае андерсоновский переход сохраняется, показатель перехода остается прежним,  $\nu = 1$ , наблюдается лишь смещение перехода в область более слабого беспорядка,  $\alpha = (c\mu)^{1/3}$ . Зависимость коэффициента диффузии от беспорядка приведена на рис. 3б.

**Вариант III.** Домножив уравнение (21) на  $M_0$  и воспользовавшись (27), получаем

$$M = M_0 + 3\lambda x_0 M + \left(\frac{M}{M_0}\right)^2 c\mu M,$$

или

$$\alpha \frac{M}{M_0} = 1 + c\mu \left(\frac{M}{M_0}\right)^3.$$

Переходя к коэффициенту диффузии, имеем

$$\alpha = \frac{D}{D_0} + \frac{c\mu}{(D/D_0)^2}. \quad (30)$$

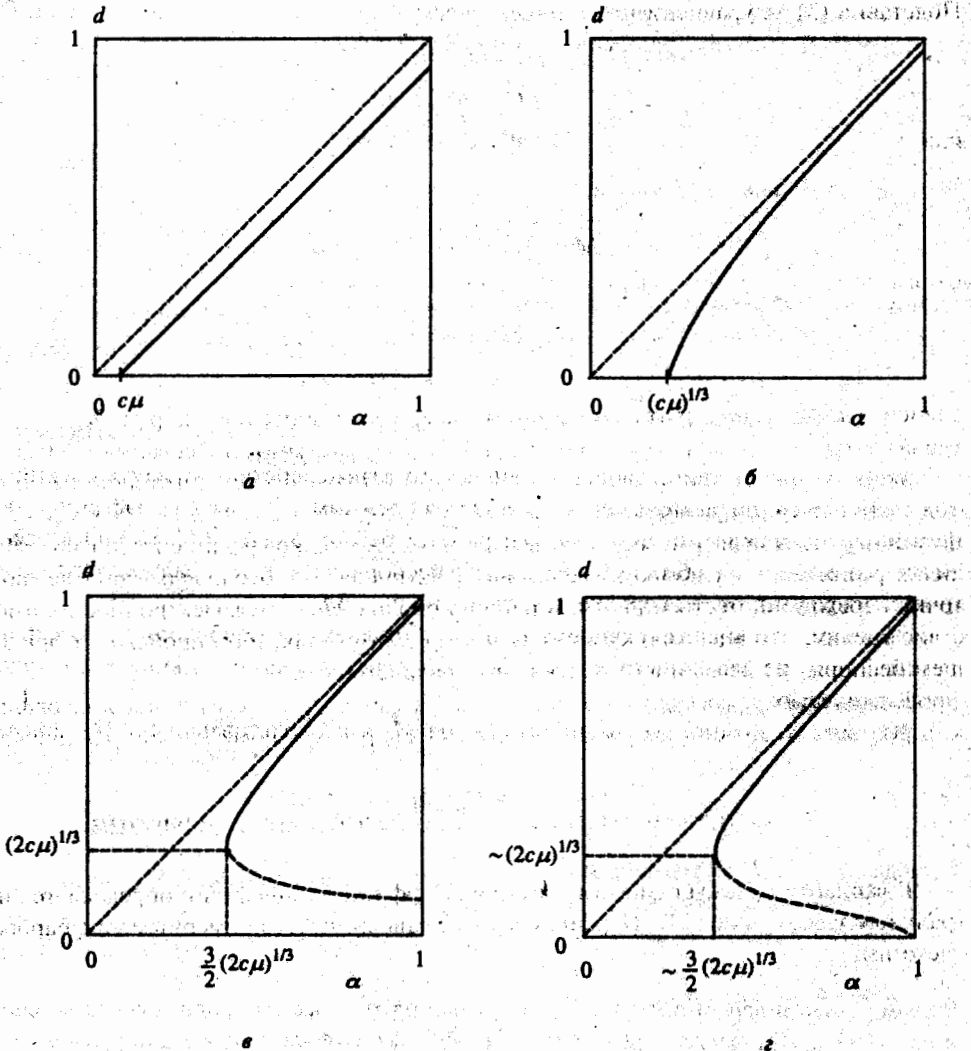


Рис. 3. Зависимость статического обобщенного коэффициента диффузии: ( $d = D(0)/D_0$ ) от беспорядка в различных схемах самосогласования для вариантов I (а); II (б); III (в); IV (г)

В этом случае мы получаем минимальную металлическую проводимость:

$$\frac{D_{min}}{D_0} = (2c\mu)^{1/3} \text{ при } \alpha = \alpha^* = \frac{3}{2}(2c\mu)^{1/3}.$$

Зависимость коэффициента диффузии от беспорядка приведена на рис. 3в.

Вариант IV. Для поправки к коэффициенту диффузии из выражения (25), воспользовавшись (27), получаем

$$\frac{\delta D_C(\omega)}{D_0} = -\frac{\delta M_0(\omega)}{M_0} = -\frac{c\mu M(\omega)}{M_0} = -c\mu \frac{D_0}{D(\omega)}. \quad (31)$$

Подставив (31) в уравнение (23), имеем

$$\frac{D}{D_0} = \frac{1}{1 + (1 - \alpha)D_0/D} - c\mu \frac{D_0}{D},$$

или

$$\alpha = \frac{c\mu}{(D/D_0)^2 + c\mu} + \frac{D}{D_0}. \quad (32)$$

Снова получаем минимальную металлическую проводимость:

$$\frac{D_{min}}{D_0} \approx (2c\mu)^{1/3} \text{ при } \alpha = \alpha^* \approx \frac{3}{2}(2c\mu)^{1/3}.$$

Зависимость коэффициента диффузии от беспорядка приведена на рис. 3г.

Качественно результаты вариантов III и IV схемы самосогласования совпадают и приводят к картине минимальной металлической проводимости, что явно не соответствует большинству современных экспериментов в этой области [1, 2]. Схемы I и II приводят к одному и тому же качественному поведению коэффициента диффузии, различия возникают только в оценке величины критического беспорядка, определяющего точку перехода. Естественно, что в наших приближениях межэлектронное взаимодействие усиливает тенденцию к переходу металл-диэлектрик, и он происходит при меньшем беспорядке, нежели в отсутствие взаимодействия.

В дальнейшем сосредоточим внимание на варианте I схемы самосогласования, в которой кулоновские и локализационные вклады рассматриваются как равноправные.

## 5. ЧАСТОТНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФфуЗИИ

В варианте I схемы самосогласования коэффициент диффузии определяется интегральным уравнением (17). Перейдем в этом уравнении к безразмерным мацубаровским частотам:

$$-\frac{i\omega}{D_0 k_0^2} \rightarrow \omega, \quad -\frac{i\Omega}{D_0 k_0^2} \rightarrow \Omega,$$

а также безразмерному коэффициенту диффузии  $d(\omega) = D(\omega)/D_0$ . В этих переменных интегральное уравнение (17) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{d(\omega)} = & 1 + \frac{d\lambda x_0^{d-2}}{d(\omega)} \int_0^1 \frac{dy y^{d-1}}{y^2 + \omega/d(\omega)} + \\ & + \frac{8}{\pi} \mu \lambda x_0^{d-2} \int_\omega^\infty \frac{d\Omega}{d(\omega + \Omega) d^2(\Omega)} \int_0^1 \frac{dy y^{d+1}}{\left[ y^2 + \frac{\omega + \Omega}{d(\omega + \Omega)} \right] \left[ y^2 + \frac{\Omega}{d(\Omega)} \right]^2}. \end{aligned} \quad (33)$$

В дальнейшем мы ограничимся лишь трехмерным случаем. Коэффициент диффузии, получаемый в обычной самосогласованной теории локализации (5), в этих обозначениях имеет вид:

$$d(\omega) = \begin{cases} \alpha = 1 - 3\lambda x_0, & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha > 0, \quad (\text{металл}), \\ (3\pi\lambda x_0/2)^{2/3} \omega^{1/3}, & \omega \gg \omega_c \quad (\text{металл и диэлектрик}), \\ \frac{(3\pi\lambda x_0/2)^2}{\alpha^2} \omega = (\xi k_0)^2 \omega, & \omega \ll \omega_c, \quad \alpha < 0 \quad (\text{диэлектрик}), \end{cases} \quad (34)$$

где  $\omega_c = |\alpha|^3 / (3\pi\lambda x_0/2)^2$ ,  $\xi$  — радиус локализации.

Введем  $K(\omega) = \omega/d(\omega)$ . Будем анализировать уравнение (33) в предположении, что  $K(\omega)$ ,  $K(\Omega)$  и  $K(\omega + \Omega) \ll 1$ . Разлагая правую часть уравнения (33) по этим малым параметрам, получаем

$$\frac{\alpha}{d(\omega)} = 1 - \frac{3\pi\lambda x_0}{2d(\omega)} \sqrt{K(\omega)} + 2\mu\lambda x_0 \int_{\omega}^{\infty} \frac{d\Omega}{d(\omega + \Omega)d^2(\Omega)} \frac{\sqrt{K(\Omega)} + 2\sqrt{K(\omega + \Omega)}}{[\sqrt{K(\Omega)} + \sqrt{K(\omega + \Omega)}]^2}. \quad (35)$$

Рассмотрим металлическую фазу, где коэффициент диффузии  $d(\omega)$  будем искать в виде

$$d(\omega) = \begin{cases} d, & \omega \ll \omega_c, \\ d(\omega/\omega_c)^{1/3}, & \omega \gg \omega_c. \end{cases} \quad (36)$$

Подставляя (36) в (35), находим  $d$  и  $\omega_c$  и для коэффициента диффузии получаем

$$d(\omega) = \begin{cases} \alpha - \alpha^*, & \omega \ll \omega_c, \\ (3\pi\lambda x_0/2)^{2/3} \omega^{1/3}, & \omega \gg \omega_c, \end{cases} \quad (37)$$

где  $\omega_c = |\alpha - \alpha^*|^3 / (3\pi\lambda x_0/2)^2$ ,  $\alpha^* = c\mu$ ,  $c \approx 0.89$ .

Итак, в металлической фазе мы получили подтверждение нашего качественного подхода (разд. 4). Андерсоновский переход сохраняется. Показатель перехода остается прежним,  $\nu = 1$ . Сам переход сместился в область несколько меньших беспорядков,  $\alpha = \alpha^* = c\mu$ . Частотное поведение коэффициента диффузии в металлической фазе качественно совпадает с результатами обычной самосогласованной теории локализации (34). В области высоких частот,  $\omega \gg \omega_c$ , поведение коэффициента диффузии вообще не изменяется при добавлении взаимодействия в систему.

Теперь рассмотрим диэлектрическую фазу. В области высоких частот,  $\omega \gg \omega_c$ , коэффициент диффузии очевидно будет иметь частотную зависимость:  $d(\omega) \propto \omega^{1/3}$ . Предположим, что в области малых частот коэффициент диффузии имеет степенную зависимость от частоты, т. е.

$$d(\omega) = \begin{cases} d(\omega/\omega_c)^\delta, & \omega \ll \omega_c, \\ d(\omega/\omega_c)^{1/3}, & \omega \gg \omega_c, \end{cases} \quad (38)$$

где  $\delta$  — некоторый неизвестный показатель степени.

Подставляя (38) в (35) и рассматривая случай  $\alpha < 0$  (диэлектрическая фаза в обычной самосогласованной теории локализации) и  $|\alpha| \gg \alpha^*$ , получаем:

$$d(\omega) = \begin{cases} \frac{(3\pi\lambda x_0/2)^2}{\alpha^2} \omega = (\xi k_0)^2 \omega, & \omega^* \ll \omega \ll \omega_c, \\ (3\pi\lambda x_0/2)^{2/3} \omega^{1/3}, & \omega \gg \omega_c, \end{cases} \quad (39)$$

где  $\omega_c = |\alpha|^3 / (3\pi\lambda x_0/2)^2$ , а  $\omega^* \approx 0.1\mu\alpha^2 / (3\pi\lambda x_0/2)^2 = 0.1\mu / (\xi k_0)^2$  — новая характерная частота, определяемая взаимодействием. Заметим, что  $\omega^* \rightarrow 0$  при приближении к точке перехода, когда  $\xi \rightarrow \infty$ .

Итак, в диэлектрической фазе достаточно далеко от перехода, когда  $\alpha < 0$  и  $|\alpha| \gg \alpha^*$  при частотах  $\omega \gg \omega^*$ , коэффициент диффузии остается таким же, как в обычной самосогласованной теории локализации, т. е. при низких частотах он линеен по частоте, а при высоких пропорционален  $\omega^{1/3}$ .

Анализ уравнения (35) показывает, что при частотах  $\omega \ll \omega^*$  невозможно, к сожалению, подобрать степенную зависимость для  $d(\omega)$ , т. е. коэффициент диффузии в диэлектрической фазе, по-видимому, не представляется в виде

$$d(\omega) = d \frac{\omega^*}{\omega_c} \left( \frac{\omega}{\omega^*} \right)^\delta,$$

где  $\delta$  — некоторый неизвестный показатель. Это обстоятельство не позволяет нам провести аналитическое рассмотрение уравнения (35) в области  $\omega \ll \omega^*$  в диэлектрической фазе.

Теперь рассмотрим поведение системы в диэлектрической фазе вблизи перехода, когда  $\alpha - \alpha^* < 0$ , однако  $\alpha > 0$ , т. е. когда система в отсутствие взаимодействия еще находилась бы в металлической фазе.

Опять предположим, что частотная зависимость коэффициента диффузии при  $\omega \ll \omega_c$  имеет степенной вид, т. е. коэффициент диффузии определяется выражением (38).

Подставляя (38) в (35), получаем  $\delta = 1/3$ . В результате для коэффициента диффузии имеем

$$d(\omega) = \begin{cases} (4.2\mu\lambda x_0/\alpha)^{2/3} \omega^{1/3}, & \omega \ll \omega_c, \\ (3\pi\lambda x_0/2)^{2/3} \omega^{1/3}, & \omega \gg \omega_c, \end{cases} \quad (40)$$

где  $\omega_c = |\alpha - \alpha^*|^3 / (3\pi\lambda x_0/2)^2$ . Естественно, что при точном решении коэффициент при  $\omega^{1/3}$  будет плавной функцией частоты, обеспечивающей гладкую сшивку в области  $\omega \sim \omega_c$ .

Итак, в диэлектрической фазе недалеко от перехода, там, где система без взаимодействия — еще металл, коэффициент диффузии ведет себя во всей области частот, как  $\omega^{1/3}$ , однако при низких частотах коэффициент перед  $\omega^{1/3}$  отличается от получаемого в обычной самосогласованной теории и зависит от кулоновского взаимодействия. Следует заметить, что если в качестве взаимодействия использовать динамически экранированное кулоновское взаимодействие (7), для которого  $\mu \sim 1$ , область применимости выражения (40) существенно расширяется, так как  $\alpha^* \sim \mu \sim 1$ .

Мы провели численное исследование интегрального уравнения (33) в широкой области частот как в металлической (рис. 4), так и в диэлектрической (рис. 5) фазах.

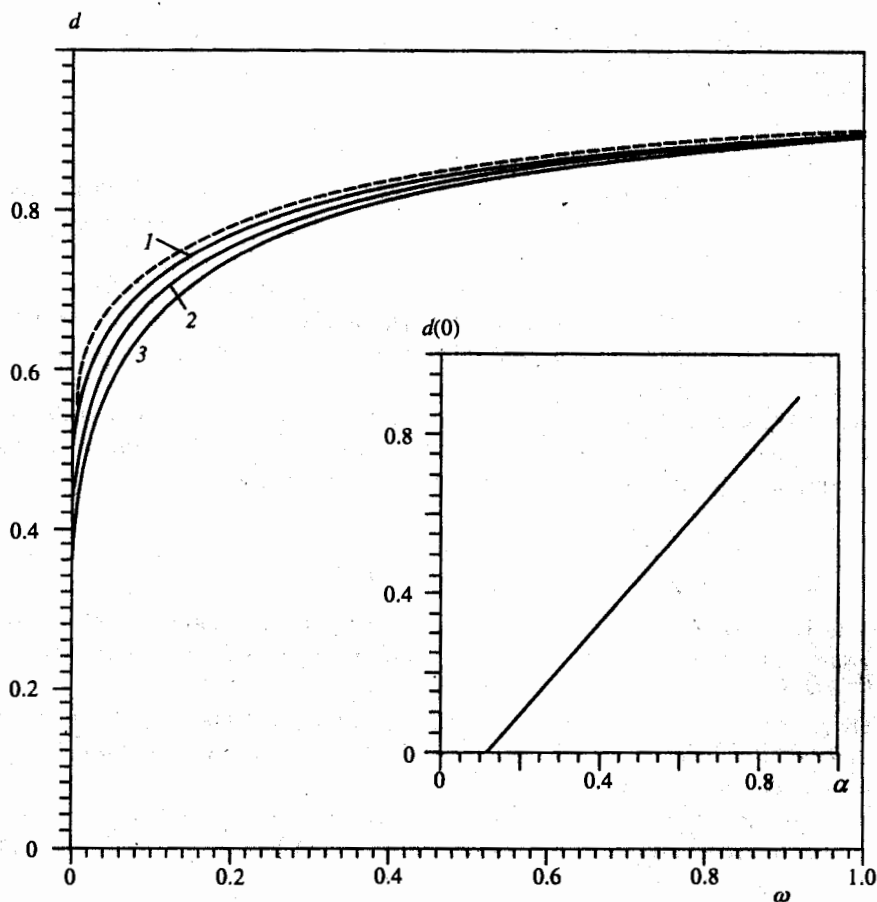


Рис. 4. Зависимость безразмерного обобщенного коэффициента диффузии от безразмерной мацубаровской частоты в металлической фазе ( $\alpha = 0.5$ ), полученная численным решением уравнения (33) при различных значениях  $\mu$ : 1 —  $\mu = 0.24$ ; 2 —  $\mu = 0.6$ ; 3 —  $\mu = 0.95$ ; штрихи — результат обычной самосогласованной теории локализации при  $\mu = 0$ . На вставке — зависимость от беспорядка статического коэффициента диффузии ( $d = D(0)/D_0$ ) при  $\mu = 0.24$

Численные результаты для частотного поведения коэффициента диффузии хорошо согласуются с полученными нами аналитически.

В области больших частот как в металлической, так и в диэлектрической фазах частотное поведение коэффициента диффузии мало отличается от предсказанного обычной самосогласованной теорией локализации.

В области малых частот в металлической фазе наблюдается уменьшение  $d(\omega)$  с ростом взаимодействия. Зависимость статического обобщенного коэффициента диффузии при  $\mu = 0.24$  от беспорядка, приведенная на вставке к рис. 4, практически линейная. Переход металл-диэлектрик в этом случае наблюдается при  $\alpha = \alpha^* = c\mu$ , где  $c \approx 0.5$ , что также неплохо согласуется с результатами нашего аналитического рассмотрения.

В диэлектрической фазе в области малых частот ( $\omega \ll \omega^*$ ) наблюдается существен-

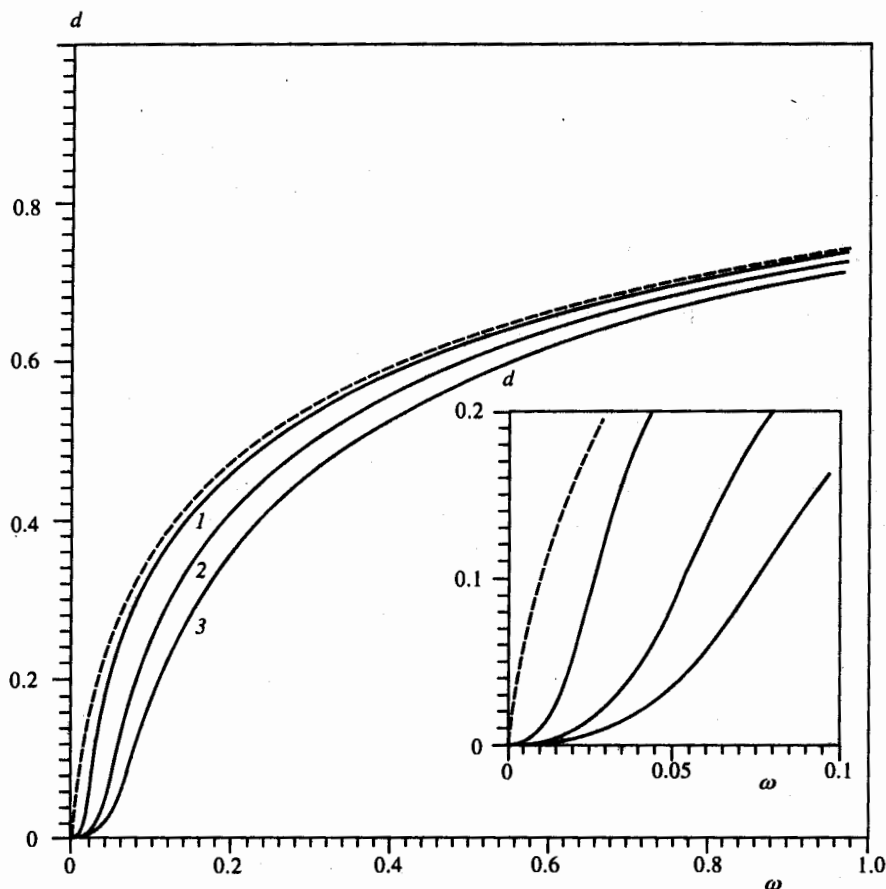


Рис. 5. Зависимость безразмерного обобщенного коэффициента диффузии от безразмерной маубаровской частоты в диэлектрической фазе ( $\alpha = -0.5$ ), полученная численным решением уравнения (33) при различных значениях  $\mu$ : 1 —  $\mu = 0.12$ ; 2 —  $\mu = 0.6$ ; 3 —  $\mu = 1.2$ ; штрихи — результат обычной самосогласованной теории локализации при  $\mu = 0$

ное отклонение от обычной самосогласованной теории локализации. Поведение коэффициента диффузии в этой области, по-видимому, неаналитично по частоте. В частотной зависимости коэффициента диффузии имеется тенденция к образованию щели при  $\omega \ll \omega^*$ .

Подчеркнем, что интегральное уравнение (33) численно исследовалось при маубаровских частотах, для которых и было записано это уравнение. Аналитическое продолжение численных результатов на область реальных частот не проводилось.

## 6. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ ВЛИЗИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИК

Рассмотрим влияние электрон-электронного взаимодействия на одноэлектронную («туннельную») плотность состояний, которая определяется известным соотношением:

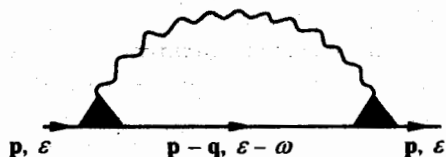


Рис. 6. «Фоковский» вклад от взаимодействия в собственно-энергетическую часть

$$N(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \int \frac{dp}{(2\pi)^3} \text{Im } G^R(p, \epsilon), \quad (41)$$

где  $\epsilon = E - E_F$  — энергия, отсчитываемая от уровня Ферми, а  $G^R(p, \epsilon)$  — запаздывающая функция Грина, определяемая выражением

$$G^R(p, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \xi_p + i\gamma - \Sigma_{ee}^R(\epsilon, p)}. \quad (42)$$

Рассмотрим «фоковский» вклад в собственно-энергетическую часть  $\Sigma_{ee}^R(\epsilon, p)$ , изображенный на рис. 6:

$$\begin{aligned} \Sigma_{ee}^R(\epsilon, p) &= i \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \int_{\epsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} G_0^A(p - q, \epsilon - \omega) v(q) \gamma^2(q, \omega) \approx \\ &\approx i\gamma^2 \mu G_0^A(p, \epsilon) [f_{\epsilon, \omega_c} + ig_{\epsilon, \omega_c}], \end{aligned} \quad (43)$$

где функции  $f_{\epsilon, \omega_c}$  и  $g_{\epsilon, \omega_c}$  определяются равенствами

$$f_{\epsilon, \omega_c} = 4N_0^{-1}(0) \text{Re} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \int_{\epsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{[-i\omega + D_E(\omega)q^2]^2}, \quad (44)$$

$$g_{\epsilon, \omega_c} = 4N_0^{-1}(0) \text{Im} \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \int_{\epsilon}^{1/\tau} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{[-i\omega + D_E(\omega)q^2]^2}, \quad (45)$$

а  $G_0^A(p, \epsilon)$  — опережающая функция Грина без взаимодействия. Здесь и далее через  $N_0(0)$  обозначена плотность состояний на уровне Ферми в отсутствие взаимодействия. Подставляя выражение для  $\Sigma_{ee}^R(\epsilon, p)$  (43) в (42), получим при  $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \frac{N(\epsilon)}{N_0(0)} &\approx -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \text{Im } G^R(p, \epsilon) = \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \frac{\xi_p^2 + \gamma^2 + \mu\gamma^2 g_{\epsilon, \omega_c}}{(\xi_p^2 + \gamma^2 + \mu\gamma^2 g_{\epsilon, \omega_c})^2 + (\mu\gamma^2 f_{\epsilon, \omega_c})^2} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2 [1 + \mu g_{\epsilon, \omega_c} + \sqrt{(1 + \mu g_{\epsilon, \omega_c})^2 + (\mu f_{\epsilon, \omega_c})^2}]} \left( 1 + \frac{1 + \mu g_{\epsilon, \omega_c}}{\sqrt{(1 + \mu g_{\epsilon, \omega_c})^2 + (\mu f_{\epsilon, \omega_c})^2}} \right)}. \end{aligned} \quad (46)$$

Перейдем к вычислению функций  $f_{\epsilon, \omega_c}$  и  $g_{\epsilon, \omega_c}$ . Как уже отмечалось выше, частотное поведение коэффициента диффузии в металлической фазе качественно совпадает с результатами обычной самосогласованной теории (со сдвинутым порогом подвижности). В диэлектрической фазе в узкой области частот  $\omega \ll \omega^*$  частотная зависимость



$D(\omega)$  нам неизвестна. Однако, учитывая, что вблизи перехода  $\omega^* \rightarrow 0$ , разумно для обобщенного коэффициента диффузии  $D(\omega)$  воспользоваться выражением (5), вытекающим из самосогласованной теории локализации, подразумевая, что роль взаимодействия сводится к простому сдвигу точки перехода.

В металлической области при  $\varepsilon \rightarrow 0$  получаем

$$f_{\varepsilon, \omega_c} = \sqrt{\frac{27}{2}} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \left( 1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\omega_c}} \right) + \frac{27}{\pi} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^3 \left[ \left( \frac{\omega_c}{1/\tau} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (47)$$

$$g_{\varepsilon, \omega_c} = \sqrt{\frac{27}{2}} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \left( 1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\omega_c}} \right) + \frac{\sqrt{27}}{2} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \ln \frac{1/\tau}{\omega_c}. \quad (48)$$

В области  $\omega_c < \varepsilon < 1/\tau$  функции  $f_{\varepsilon, \omega_c}$  и  $g_{\varepsilon, \omega_c}$  сводятся к

$$f_{\varepsilon, \omega_c} = \frac{27}{\pi} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^3 \left[ \left( \frac{\varepsilon}{1/\tau} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (49)$$

$$g_{\varepsilon, \omega_c} = \frac{\sqrt{27}}{2} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \ln \frac{1/\tau}{\varepsilon}. \quad (50)$$

Используя формулы (47)–(50), перейдем к анализу выражения (46) для плотности состояний  $N(\varepsilon)$ . В случае относительно слабого беспорядка  $f_{\varepsilon, \omega_c}, g_{\varepsilon, \omega_c} \ll 1$ , при  $\mu \ll 1$  можно ограничиться линейным членом по  $\mu$ , и мы получаем поправку, найденную в работах [10, 11]:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} \approx 1 - \frac{\mu}{2} g_{\varepsilon, \omega_c}. \quad (51)$$

При движении к порогу подвижности ( $\gamma \sim E_F, \omega_c \rightarrow 0$ ) функция  $g_{\varepsilon, \omega_c}$  логарифмически расходится ( $g_{\varepsilon, \omega_c} \propto \ln(1/\tau\omega_c)$ ) и использование поправочного выражения (51) оказывается недостаточным. Плотность состояний необходимо вычислять по полной формуле (46). Заметим, что в работах [10, 11] не была также учтена частотная зависимость коэффициента диффузии, которая, как мы увидим, играет заметную роль при движении к порогу подвижности. При  $\omega_c \rightarrow 0$  можно пренебречь в (46) функцией  $f_{\varepsilon, \omega_c}$  по сравнению с расходящейся функцией  $g_{\varepsilon, \omega_c}$ . Имеем

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} \approx \frac{1}{\sqrt{1 + \mu g_{\varepsilon, \omega_c}}} \approx 1 - \mu \sqrt{\frac{27}{8}} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \left( 1 - \sqrt{\frac{\varepsilon}{\omega_c}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \ln \frac{1/\tau}{\omega_c} \right). \quad (52)$$

Таким образом, в случае слабого беспорядка вблизи уровня Ферми возникает известная корневая зависимость плотности состояний [3]. При движении к порогу подвижности ( $\omega_c \rightarrow 0$ ) из-за расходящегося члена  $\ln(1/\tau\omega_c)$  минимум становится все более глубоким, и на самом пороге подвижности ( $\omega_c = 0$ ) плотность состояний на уровне Ферми обращается в нуль. Следует отметить, что корневая зависимость имеется лишь в области  $0 < \varepsilon < \omega_c$ , ширина которой уменьшается при движении к порогу подвижности. В области  $\omega_c < \varepsilon < 1/\tau$  имеем

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} \approx \left[ 1 + \mu \frac{\sqrt{27}}{2} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \ln \frac{1/\tau}{\varepsilon} \right]^{-1/2}, \quad (53)$$

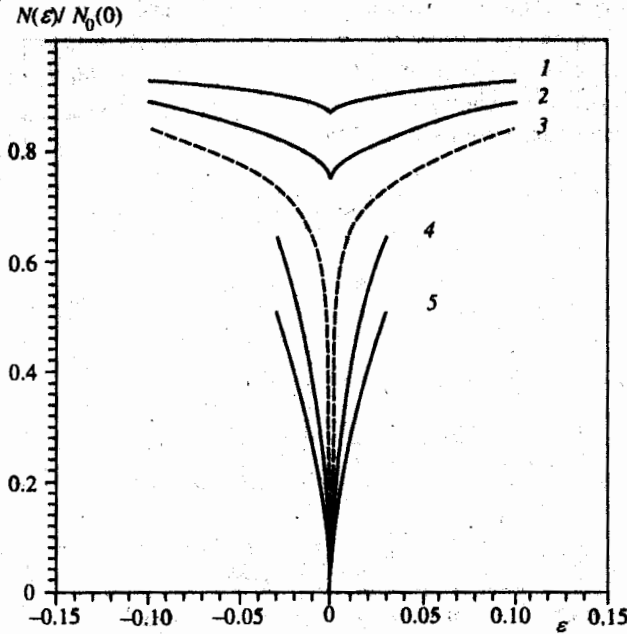


Рис. 7. Эволюция плотности состояний при переходе металл-диэлектрик в системе с взаимодействием ( $\mu = 0.2$ ; бесконечная зона проводимости). Кривые приведены при различных параметрах беспорядка  $\lambda/\lambda_c$ : 1 — 0.5; 2 — 0.7; 3 — 1.0; 4 — 1.4; 5 — 1.8

а на самом пороге подвижности ( $\gamma \sim E_F$ )

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0(0)} \approx \left( 1 + \mu \frac{\sqrt{27}}{2} \ln \frac{1/\tau}{\epsilon} \right)^{-1/2} \quad (54)$$

На рис. 7 (кривые 1-3) приведены результаты численных расчетов функций  $f_{\epsilon, \omega_c}$  и  $g_{\epsilon, \omega_c}$  и плотности состояний по формуле (46), демонстрирующие образование и рост псевдощели в плотности состояний. Графики представлены при различных параметрах  $\lambda/\lambda_c$ , где  $\lambda_c$  — критический параметр беспорядка, при котором наступает переход металл-диэлектрик. Штрихами показано поведение плотности состояний на самом пороге подвижности ( $\lambda/\lambda_c = 1$ ).

В диэлектрической области функции  $g_{\epsilon, \omega_c}$  и  $f_{\epsilon, \omega_c}$  при  $\epsilon \rightarrow 0$  имеют вид

$$f_{\epsilon, \omega_c} = \frac{\sqrt{27}}{2} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \left( 1 - \frac{\omega_c}{\epsilon} \right) + \frac{27}{\pi} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^3 \left[ \left( \frac{\omega_c}{1/\tau} \right)^{1/3} - 1 \right], \quad (55)$$

$$g_{\epsilon, \omega_c} = \frac{\sqrt{27}}{2} \left( \frac{\gamma}{E_F} \right)^2 \ln \frac{1/\tau}{\omega_c}. \quad (56)$$

Пренебрегая в (46)  $g_{\epsilon, \omega_c}$  по сравнению с расходящейся при  $\epsilon \rightarrow 0$  функцией  $f_{\epsilon, \omega_c}$ , получаем

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0(0)} \approx 4 \sqrt{\frac{\epsilon}{27\mu\omega_c}} \quad (57)$$

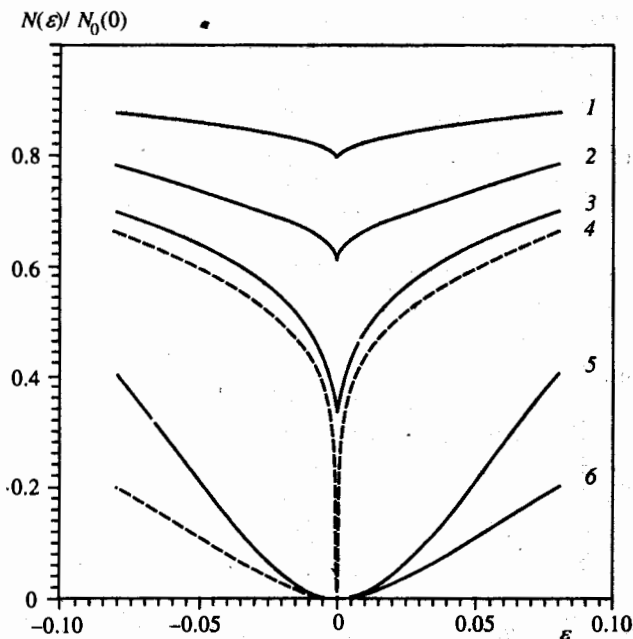


Рис. 8. Эволюция плотности состояний при переходе металл-диэлектрик в системе с взаимодействием ( $\mu = 0.3$ ; конечная зона проводимости  $2B = 4E_F$ ). Кривые приведены при различных параметрах беспорядка  $\lambda/\lambda_c$ : 1 — 0.5; 2 — 0.7; 3 — 0.9; 4 — 1.0; 5 — 2.0; 6 — 2.4

Таким образом, в диэлектрической области сохраняется корневая зависимость при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , которая при увеличении беспорядка расширяется. В области  $\omega_c < \varepsilon < 1/\tau$  остается та же зависимость (53) (рис. 7, кривые 4, 5).

Выше рассматривался случай бесконечно широкой зоны проводимости. Существенные изменения возникают при рассмотрении зоны конечной ширины  $2B$  в диэлектрической области. В модели линейного спектра получаем

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} = \frac{\gamma}{\pi} \int_{-B}^B d\xi_p \frac{\xi_p^2 + \gamma^2}{(\xi_p^2 + \gamma^2)^2 + (\mu\gamma^2 f_{\varepsilon, \omega_c})^2}. \quad (58)$$

Анализ выражений (55) и (58) показывает, что плотность состояний в области  $\varepsilon \ll \ll \mu\omega_c (\gamma/B)^2$  ведет себя квадратичным по  $\varepsilon$  образом:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0(0)} \sim \left(\frac{B}{\gamma}\right)^3 \left(\frac{E_F}{\gamma}\right)^4 \frac{1}{\mu^2} \left(\frac{\varepsilon}{\omega_c}\right)^2, \quad (59)$$

что напоминает известное поведение «кулоновской щели» Эфроса — Шкловского [13, 14] в диэлектрической фазе далеко от перехода. Заметим, что это совпадение возможно является случайным, поскольку в схеме Эфроса — Шкловского определяющую роль играет дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия. Результаты численного расчета  $N(\varepsilon)$  представлены на рис. 8 (кривые 5, 6). В металлической

области в случае зоны конечной ширины, как показывают численные расчеты, ситуация практически не меняется по сравнению с рассмотренным выше случаем зоны бесконечной ширины.

Поведение туннельной плотности состояний типа представленного на рис. 8 наблюдалось экспериментально на целом ряде неупорядоченных систем вблизи перехода металл–диэлектрик [1, 2] от аморфных сплавов [15–17] до неупорядоченных монокристаллов металлооксидов, включая высокотемпературные сверхпроводники [18]. При полном качественном соответствии эксперимента и рассматриваемой теории, нужно отметить, что количественное соответствие отсутствует — эффективная ширина «псевдощели» вблизи перехода в эксперименте больше и описывается степенной, а не логарифмической зависимостью. В то же время мы получаем значительное общее понижение плотности состояний в широком интервале энергий, что наблюдается во всех экспериментах. Полученные выражения, насколько нам известно, впервые дают описание эволюции туннельной плотности состояний при вызываемому разупорядочением, во всем интервале параметров, контролирующих этот переход.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложена схема самосогласования, позволяющая описать вызываемый разупорядочением переход металл–диэлектрик с учетом межэлектронного взаимодействия, учитываемого в первом порядке теории возмущений. В основе предлагаемого подхода лежит предположение, что переход без взаимодействия может быть достаточно полно описан в рамках самосогласованной теории локализации, а роль взаимодействия может быть учтена путем равноправного учета вкладов соответствующих диаграмм в уравнении для обобщенного коэффициента диффузии. Мы показали, что такой подход позволяет описать едиными уравнениями переход от металлического к диэлектрическому состоянию и получить ряд результатов, находящихся в качественном согласии с экспериментом (туннельная плотность состояний). Вместе с тем роль взаимодействия в рассматриваемом подходе остается относительно небольшой, и в широком интервале параметров коэффициент диффузии хорошо описывается самосогласованной теорией локализации. В частности, металлическая проводимость (при  $T = 0$ ) линейно обращается в нуль в точке перехода, что хорошо соответствует эксперименту на ряде систем [1, 2], но не позволяет описать известный класс неупорядоченных систем, где такое обращение в нуль происходит скорее корневым образом по параметру беспорядка [1, 2].

С чисто теоретической точки зрения, даже ограничиваясь первым порядком по взаимодействию, следует еще полностью проанализировать роль отброшенных выше «хартриевских» диаграмм, так же как и роль особенностей экранирования в диэлектрической фазе [5, 11]. Мы совершенно не обсудили также возможную роль спиновых эффектов, возрастающее значение которых вблизи перехода металл–диэлектрик отмечается уже давно [1, 2].

Тем не менее предложенная схема рассмотрения представляет, по нашему мнению, достаточный интерес, поскольку позволяет определенным образом учесть эффекты взаимодействия в широком интервале параметров, контролирующих переход металл–диэлектрик, включая даже диэлектрическую фазу, что до сих пор не было реализовано ни в одном из известных подходов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта № 93-02-2066, а также при частичной поддержке Международного научного фонда Сороса, грант RGL000.

## Литература

1. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
2. D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
3. B. L. Altshuler and A. G. Aronov, in *Electron-Electron Interaction in Disordered Systems*, ed. by M. Pollak and A. L. Efros, North-Holland, Amsterdam (1984), p. 1.
4. A. M. Finkelstein, *Sov. Sci. Rev. A. Phys.* **14**, 1 (1990).
5. D. Vollhardt and P. Wölfle, in *Anderson Localization*, ed. by Y. Nagaoka and Fukuyama; Springer, New York (1982), p. 26.
6. M. V. Sadovskii, *Sov. Sci. Rev. A. Phys.* **7**, 1 (1986).
7. D. Vollhardt and P. Wölfle, in *Electronic Phase Transition*, ed. by W. Hanke and Yu. V. Kopayev, North-Holland, Amsterdam (1992), p. 1.
8. J. Kroha, T. Kopp, and P. Wölfle, *Phys. Rev. B* **41**, 888 (1990).
9. J. Kroha, *Physica A* **167**, 231 (1990).
10. М. И. Кацнельсон, М. В. Саловский, *ФТТ* **25**, 3372 (1983).
11. М. И. Кацнельсон, М. В. Саловский, *ЖЭТФ* **87**, 523 (1984).
12. B. L. Altshuler, D. Khmelnitskii, A. I. Larkin, and P. A. Lee, *Phys. Rev. B* **22**, 5142 (1980).
13. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, *J. Phys. C* **4**, L49 (1975).
14. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, in *Electron-Electron Interaction in Disordered Systems*, ed. by M. Pollak and A. L. Efros, North-Holland, Amsterdam (1984), p. 409.
15. W. L. McMillan and J. Mochel, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 556 (1981).
16. Y. Imry and Z. Ovadyahu, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 841 (1982).
17. G. Hertel, D. J. Bishop, E. G. Spencer, et al., *Phys. Rev. Lett.* **50**, 743 (1983).
18. H. Srikanth, K. P. Rajeev, G. V. Shivashankar, and A. K. Raychaudhuri, *Physica C* **195**, 87 (1992).