

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ. ПОРОГ ПОДВИЖНОСТИ И ТЕОРИЯ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ

М. В. Садовский

Показано, что наиболее вероятное пространственное поведение одноэлектронной функции Грина в области локализованных состояний вблизи порога подвижности в модели Андерсона совпадает с пространственным поведением корреляционной функции в критической области фазового перехода второго рода с нулькомпонентным параметром порядка.

Представления о локализации электронов в случайном поле лежат в основе современной теории неупорядоченных систем [1]. Наиболее разработанной схемой рассмотрения задачи о локализации является известная модель Андерсона [2-4], описывающая электрон, распространяющийся в регулярной решетке со случайными уровнями энергии на разных узлах. Большинство работ по модели Андерсона посвящено доказательству локализации электронных состояний при достаточно большом отношении параметра разброса уровней W к амплитуде перехода электрона с узла на узел V , определению критического отношения W_c/V , а также определению порогов подвижности E_c , т. е. критических энергий электрона в зоне, разделяющих области локализованных и делокализованных состояний [1, 2, 4]. Представляет большой интерес изучение характера электронных состояний вблизи порога подвижности, так как соответствующие характеристики существенно определяют кинетику и другие электронные свойства неупорядоченных систем [5]. Попытки в этом направлении предпринимались в работах Андерсона, Эдвардса и Фрида [3, 6, 7].

Существует ряд очевидных аналогий задачи о локализации электрона вблизи порога подвижности и задачи описания критических явлений вблизи точки фазового перехода второго рода. Например, при приближении энергии электрона к порогу подвижности в области локализованных состояний расходится радиус локализации электронной волновой функции, аналогично тому, как расходится радиус корреляции флуктуаций в точке фазового перехода. Это наводит на мысль, что пространственное поведение электронных состояний вблизи порога подвижности может описываться характеристными для задачи фазовых переходов («скейлинговыми») зависимостями с критическими индексами, определяемыми только размерностью пространства и соответствующего параметра порядка [8].

В настоящей работе, используя метод Андерсона [3], мы показываем, что наиболее вероятное пространственное поведение одноэлектронной функции Грина на пороге подвижности совпадает с пространственным поведением корреляционной функции задачи критических явлений с нулевым числом компонент параметра порядка [9, 10].

Гамильтониан модели Андерсона имеет вид [2, 3]

$$H = \sum_j E_j a_j^\dagger a_j + \sum_{ij} V_{ij} a_i^\dagger a_j. \quad (1)$$

Здесь a_i^+ , a_i — электронные операторы рождения и уничтожения на узле решетки i , E_j — случайные уровни энергии на узлах, распределенные по закону

$$P(E_j) = \begin{cases} 1/W, & |E_j| < 1/2W \\ 0, & |E_j| > 1/2W \end{cases} \quad (2)$$

Амплитуда перехода с узла на узел V_{ij} считается отличной от нуля и равной константе V только для переходов между ближайшими соседями.

Характер электронных состояний определяется одноэлектронной функцией Грина

$$G_{ij}(E) = \left\langle \mathbf{R}_i \left| \frac{1}{E-H} \right| \mathbf{R}_j \right\rangle, \quad (3)$$

представляющей собой амплитуду перехода электрона с энергией E с узла в точке \mathbf{R}_j на узел в точке \mathbf{R}_i . Для этой функции Грина строится перенормированный ряд теории возмущений по V . Как показал Андерсон [2], задача о локализации сводится к исследованию сходимости этого ряда, причем ввиду случайного характера величин E_j сходимость понимается в смысле сходимости по вероятности [2, 4]. В области локализованных состояний ряд сходится с вероятностью единица, а условие сходимости определяет критическое отношение W_c/V или положение порога локализации в зоне.

Наиболее вероятное поведение функции Грина представляется в виде [2, 3]

$$G_{ij}(E)|_{E=0} \sim \sum_{N=0}^{\infty} Z_N(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \left(\frac{2eV}{W} \right)^N \Psi^N \left(\frac{V}{W}, K \right), \quad (4)$$

где $Z_N(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$ — число путей без пересечений из N шагов, связывающих узел j с узлом i , Ψ — медленно меняющаяся (логарифмическая) функция отношения V/W и так называемой константы связности решетки K [2]. Для простоты далее рассматривается переход Андерсона в центре зоны (при $E=0$). В общем случае в (4) следует заменить $2V/W$ на $2V\rho(E)$, где $\rho(E)$ — плотность электронных состояний [3]. Критический разброс уровней W_c , соответствующий порогу локализации, определяется уравнением [2]

$$1 = \frac{2eV}{W_c} K \Psi \left(\frac{V}{W_c}, K \right). \quad (5)$$

При $E \neq 0$ условие типа (5) обсуждалось в [1, 4].

Таким образом, пространственное поведение функции Грина целиком определяется статистикой путей без пересечений, через функцию $Z_N(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$. Андерсон [3] и Таулес [11] использовали $Z_N(\mathbf{R})$, полученную в результате машинных экспериментов. Мы воспользуемся аналитической теорией де Женна и де Клуазо [9, 10]. Используя метод ϵ -разложения Вильсона [8], де Женн и де Клуазо рассмотрели статистику случайных блужданий без пересечений и показали, что интересующая нас функция $Z_N(\mathbf{R})$ в пространстве размерности d определяется обратным преобразованием Лапласа

$$Z_N(\mathbf{R}) = \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} e^{Ns} G_V(s, \mathbf{R}) \quad (6)$$

от неперенормированной функции Грина $G_V(s, \mathbf{R})$ евклидовой теории поля

(теории фазовых переходов Гинзбурга — Ландау) с лагранжианом вида

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \{(\nabla \Phi_j)^2 + m_0^2 \Phi_j^2\} + \frac{1}{8} g_0 \left(\sum_{j=1}^n \Phi_j^2 \right)^2, \quad (7)$$

где n — число компонент поля Φ , равное в рассматриваемой задаче нулю. (Условие $n=0$ исключает «лишние» диаграммы с петлями, отсутствующие в задаче о блуждании без пересечений.) Безразмерный параметр s связан с неперенормированной массой $s = m_0^2 a^2$, где a — характерная длина порядка параметра решетки. Фазовому переходу соответствует [8] обращение в нуль перенормированной массы m теории поля (7), при $s \rightarrow s_c$

$$m \sim a^{-1} (s - s_c)^{-\nu}, \quad (8)$$

где ν — критический индекс корреляционной длины.

В (6) следует взять $c > s_c$. Параметр s_c связан с константой связности решетки [9, 10, 12]:

$$K = \exp(s_c). \quad (9)$$

Используя (6) в (3), получаем

$$\begin{aligned} C_{ij} &\sim \sum_{N=0}^{\infty} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} \exp\{N(s-s_c)\} G_U(s, \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \left(\frac{2eV}{W} K\right)^N \Psi^N\left(\frac{V}{W}, K\right) \approx \\ &\approx \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} G_U(s, \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \sum_{N=0}^{\infty} \exp\left\{N(s-s_c) + N \ln \frac{W_c}{W}\right\} = \\ &= G_U\left(\ln \frac{W}{W_c} + s_c; \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j\right) \end{aligned} \quad (10)$$

— основной результат, показывающий, что наиболее вероятное пространственное поведение одноэлектронной функции Грина модели Андерсона в области локализованных состояний вблизи порога подвижности ($W \geq W_c$) совпадает с поведением корреляционной функции теории фазовых переходов (7) с $n=0$, причем $W = W_c$ отвечает точке перехода.

При $W \geq W_c$ функция Грина экспоненциально спадает с расстоянием [8]:

$$G_{ij} \sim \exp\left\{-\frac{|\mathbf{R}|}{R_{loc}}\right\}; \quad |\mathbf{R}| = |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \gg R_{loc}, \quad (11)$$

где

$$R_{loc} \sim m^{-1} \sim a \left| \frac{W - W_c}{W_c} \right|^{-\nu} \quad (12)$$

играет роль радиуса локализации. Аналогично, при $E \neq 0$, но при $E \approx E_c$

$$R_{loc} \sim a \left| \frac{E - E_c}{E_c} \right|^{-\nu}.$$

В рамках ε -разложения ($d=4-\varepsilon$) Вильсона при $n=0$ имеем

$$\nu \approx \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon}{8} + \frac{15}{256} \varepsilon^2 + \dots \right\} \approx 0,592 \quad \text{при } \varepsilon=1, \quad (13)$$

в прекрасном согласии с результатом Андерсона $\nu=0,6$ [3], полученным из машинного анализа статистики путей без пересечений.

При $W = W_c$ имеем

$$G_{ij} \propto |\mathbf{R}|^{-(d-2+\nu)}, \quad (14)$$

где

$$\eta \approx \frac{\varepsilon^2}{64} \left\{ 1 + \frac{17}{16} \varepsilon \right\} \approx 0,032 \quad \text{при} \quad \varepsilon=1. \quad (15)$$

Малость критического индекса η означает, что в данной модели невозможна локализация со степенным характером спада волновых функций, предполагавшаяся Таулесом [11], использовавшим, по-видимому, ненадежные численные значения критических индексов в предэкспоненциальном множителе в $Z_N(\mathbf{R})$, полученные при машинном анализе. В аналоге формулы (14) в [11] показатель степени равен $17/9$, что попадает в область от $3/2$ до $5/2$ возможных по Таулесу значений показателя степенной локализации. В нашем случае $d-2+\eta \approx 1,032$ для $d=3$.

Приведенные выше асимптотические формулы (11) и (14), естественно, могут быть также получены с непосредственным использованием асимптотических формул для $Z_N(\mathbf{R})$, полученных де Клуазо [10].

Проведенное рассмотрение неприменимо в одномерном случае, так как в рассматриваемой модели с взаимодействием между ближайшими соседями перенормированный ряд Андерсона для электронной функции Грина содержит всего два слагаемых, соответствующих двум возможным путям без пересечений [13]. Вопрос о локализации сводится к исследованию сходимости некоторой непрерывной дроби, а статистика путей без пересечений не играет особой роли. Поэтому одномерная модель фазового перехода типа Гинзбурга — Ландау, по-видимому, не имеет прямого отношения к задаче о локализации электронов в одномерной неупорядоченной системе. Из других соображений этот же вывод получен в недавней работе Таулеса [14].

В заключение подчеркнем, что выше рассматривалась наиболее вероятная функция Грина электрона вблизи порога подвижности. В работах Эдвардса [6] и Фрида [7] отмечалась аналогия задачи о блуждании без пересечений и задачи вычисления одноэлектронной функции Грина, усредненной по хаотическим конфигурациям примесей. Исходя из этой аналогии, нетрудно убедиться, что диаграммный ряд Эдвардса для такой функции Грина [15], в гауссовом приближении для статистики примесей, порождается диаграммным рядом для $G_U(s)$ задачи (7) с $n=0$ после соответствующего аналитического продолжения по параметрам лагранжиана (см. также работу [14]). Существенно, однако, что при этом меняется знак константы взаимодействия g_0 , так что соответствие с теорией фазовых переходов, по-видимому, теряется. Физически это связано с тем, что случайные блуждания без пересечений эквивалентны термодинамике полимерной цепи с отталкиванием между звеньями, тогда как термодинамика электрона в системе примесей — полимеру с притяжением [6]. Вопрос о возможности применения ε -разложения Вильсона в этой задаче остается открытым.

Автор выражает свою глубокую благодарность Л. В. Келдышу и Ю. А. Изюмову за обсуждение широкого круга вопросов, связанных с этой работой.

Институт физики металлов
Уральского научного центра
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
3 декабря 1975 г.

Литература

- [1] D. J. Thouless. Physics Reports, 13C, 93, 1974.
- [2] P. W. Anderson. Phys. Rev., 109, 1492, 1958.
- [3] P. W. Anderson. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 69, 1097, 1972.

- [4] E. N. Economou, M. H. Cohen. Phys. Rev., **B5**, 2931, 1972.
- [5] N. F. Mott, E. A. Davis. Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Oxford, 1971.
- [6] S. F. Edwards. J. Non-Cryst. Solids, **4**, 417, 1970. S. F. Edwards, R. Abram. J. Phys., **C5**, 1185, 1196, 1972.
- [7] K. F. Freed. Phys. Rev., **B5**, 4802, 1972.
- [8] K. G. Wilson, J. Kogut. Physics Reports, **12C**, 75, 1974.
- [9] P. G. de Gennes. Phys. Lett., **38A**, 339, 1972.
- [10] J. des Cloizeaux. Phys. Rev., **A10**, 1665, 1974.
- [11] D. J. Thouless. J. Phys., **C7**, 699, 1974.
- [12] V. K. S. Shante, S. Kirkpatrick. Adv. Phys., **20**, 325, 1971.
- [13] E. N. Economou, M. H. Cohen. Phys. Rev., **B4**, 396, 1971.
- [14] D. J. Thouless. J. Phys., **C8**, 1803, 1975.
- [15] S. F. Edwards. Phil. Mag., **3**, 1020, 1958.

**LOCALIZATION OF ELECTRONS IN DISORDERED SYSTEMS.
THE MOBILITY EDGE AND THEORY
OF CRITICAL PHENOMENA**

M. V. Sadovsky

It is shown that the most probable spatial behavior of the one-electron Green function in the localized state region near the mobility edge in the Anderson model is the same as the spatial behavior of the correlation function in the critical region of a phase transition of the second kind with a zero-component order parameter.
