

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДЕЛИ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ И В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

М. В. Садовский

Рассматривается локализация электронов в модели Андерсона с беспорядком в фазах интегралов переноса. Кратко обсуждается роль локальной калибровочной инвариантности. С помощью метода Андерсона показано, что беспорядок такого типа приводит в общем случае к эффективному уменьшению константы связности решетки и способствует локализации. Полная локализация зоны за счет одного только фазового беспорядка, однако, невозможна. Исследовано влияние внешнего магнитного поля на положение порогов подвижности (в пренебрежении спиновыми эффектами). Показано, что результат воздействия магнитного поля определяется функцией распределения площадей путей без пересечения на решетке. В общем случае магнитное поле способствует локализации, его действие аналогично эффекту случайных фаз интегралов переноса. Результаты справедливы в области достаточно сильных полей, в которых эффекты, связанные с диаграммами Лангера — Нила, подавлены.

Введение

В последнее время возрос интерес к явлению локализации электронов в неупорядоченных системах [1–3]. Это связано как с важностью данного явления для теории неупорядоченных систем, так и с появлением новых экспериментов, в которых локализация проявляется необычным образом [3]. Вместе с тем уровень теоретического понимания локализации остается еще недостаточным, что, в частности, проявляется в неисследованности роли различных внешних полей (прежде всего магнитного), а также различных типов беспорядка. До недавнего времени подавляющее большинство работ было посвящено изучению локализации в модели Андерсона [4, 5] с диагональным (узельным) беспорядком уровней электрона в решетке. При этом обсуждалась в основном величина критического беспорядка, приводящего к полной локализации всех состояний в зоне. Лишь сравнительно недавно началось серьезное рассмотрение роли недиагонального беспорядка (интегралов переноса), что сразу же привело к выводам о его необычной роли в рассматриваемом явлении, и, в частности к выводу о невозможности полной локализации в зоне за счет одного только беспорядка такого типа [6]. Наконец, в связи с появлением работы Абрахамса и др. [7] произошел скачок интереса к критическому поведению на пороге подвижности и интересным предсказаниям относительно локализации в двумерных системах [7–10] (см. обзор [3]).

В данной работе мы рассмотрим явление локализации в специфической модели недиагонального беспорядка (модель случайных фаз), интересной отличительной чертой которой является наличие локальной калибровочной инвариантности. Обобщение результатов, полученных в этой модели, позволяет рассмотреть влияние внешнего магнитного поля на положение порогов подвижности через его влияние на орбитальное движение (в пренебрежении спиновыми эффектами). Рассмотрение прово-

дятся в рамках стандартного подхода Андерсона [4–6]. Соотношение полученных результатов с результатами, полученными в рамках другого подхода [9, 10], будет обсуждено в Заключение.

§ 1. Локальная калибровочная инвариантность в модели Андерсона

Рассмотрим гамильтониан модели Андерсона:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} a_i^+ a_j + \sum_i E_i a_i^+ a_i, \quad (1)$$

где a_i^+ , a_i — операторы рождения и уничтожения электрона на i -м и j -м узлах решетки. Энергии E_i на узлах будут считаться случайными, их распределение будет задаваться в обычном виде:

$$P\{E_i\} = \prod_i P(E_i), \quad (2)$$

$$P(E_i) = \begin{cases} W^{-1}, & |E_i| < W \\ 0, & |E_i| > W \end{cases}$$

Величины интегралов переноса J_{ij} , которые считаются отличными от нуля только между ближайшими соседями, также будут принимать случайные значения.

Мы рассмотрим специфическую модель беспорядка, в которой случайной является фаза интеграла переноса, а не его модуль, что было рассмотрено Антониу и Эконому [6]. Таким образом, мы принимаем (модель случайных фаз)

$$J_{ij} = J \exp(i\Phi_{ij}) \equiv JU_{ij}, \quad (3)$$

$$J_{ij} = J_{ji}, \quad \Phi_{ij} = -\Phi_{ji},$$

где Φ_{ij} — случайная величина, распределение которой в решетке будет предполагаться факторизующимся по связям:

$$P\{\Phi_{ij}\} = \prod_{\langle ij \rangle} P(\Phi_{ij}), \quad (4)$$

а для $P(\Phi_{ij})$ будут рассмотрены различные случаи:

$$P(\Phi_{ij}) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \Phi} \exp\left\{-\frac{\Phi_{ij}^2}{2\Phi^2}\right\}, \quad (5)$$

$$P(\Phi_{ij}) = \begin{cases} \Phi^{-1}, & |\Phi_{ij}| < \Phi \\ 0, & |\Phi_{ij}| > \Phi \end{cases}, \quad (6)$$

$$P(\Phi_{ij}) = c\delta(\Phi_{ij} - \pi) + (1-c)\delta(\Phi_{ij}), \quad 0 < c < 1 \quad (7)$$

и т. п. Случай (7) соответствует случайному включению (c концентрацией c) «антиферромагнитных» связей:

$$J_{ij} = JA_{ij}, \quad (8)$$

$$P(A_{ij}) = \begin{cases} c & A_{ij} = -1 \\ 1-c, & A_{ij} = +1 \end{cases}. \quad (9)$$

Легко видеть, что гамильтониан Андерсона (1) обладает локальной калибровочной симметрией. Он инвариантен относительно преобразования следующего вида:

$$\{G\}: a_i^+ \rightarrow \exp(i\Phi_i) a_i^+, \quad a_j \rightarrow \exp(-i\Phi_j) a_j, \quad (10)$$

$$J_{ij} \rightarrow \exp(-i\Phi_i) J_{ij} \exp(i\Phi_j).$$

Это есть аналог локального калибровочного преобразования в теории полей Янга — Миллса на решетке, которое в последнее время активно используется в теории случайных спиновых систем (спиновых стекол) [11, 12]. Из такой инвариантности следует, как известно, ряд нетривиальных выводов для магнитных систем [11, 12], часть которых непосредственно переносится и на рассматриваемую модель. В частности, если в (3)

$$\Phi_{ij} = \alpha_i + \alpha_j, \quad (11)$$

где α_i, α_j — случайные величины, то такой беспорядок тривиален и может быть устранен соответствующим локальным калибровочным преобразованием. Это распространяется и на случай (8), если $A_{ij} = c_i c_j$, причем $c_i = \pm 1$ случайным образом (аналог модели Маттиса в теории спиновых стекол). Интерес представляет нетривиальный (калибровочно-инвариантный) беспорядок, который определяется [11, 12] распределением фрустраций (frustration) на рассматриваемой решетке. Определение фрустраций [11] (или угла фрустрации [12]) может быть дано в рассматриваемой электронной модели вполне аналогично тому, как это делается в теории случайных спиновых систем. Распределения фрустраций, изучаемые в спиновых решетках [12, 13], могут оказаться полезными и в теории локализации.

Переходя к рассмотрению электронных функций Грина в решетке Андерсона, заметим, что одноэлектронная функция Грина

$$G_{ij}(E) = \left\langle i \left| \frac{1}{E-H} \right| j \right\rangle = \left\langle 0 \left| a_i \frac{1}{E-H} a_j^+ \right| 0 \right\rangle \quad (12)$$

не является калибровочно-инвариантной:

$$\{G\}: G_{ij}(E) \rightarrow G_{ij}(E) \exp[i(\Phi_i - \Phi_j)]. \quad (13)$$

Калибровочно-инвариантен только ее диагональный по узлам элемент $G_{ii}(E)$, который обычно и используется при изучении локализации в стандартном подходе Андерсона [4–6]. Из сказанного очевидно, что в модели случайных фаз усредненная одноэлектронная функция Грина диагональна по узловым индексам:

$$\langle G_{ij}(E) \rangle = G(E) \delta_{ij}, \quad (14)$$

что отражает обращение в нуль калибровочно-неинвариантных недиагональных элементов при усреднении по калибровочно-инвариантному распределению фрустраций. Поэтому (14) бессмысленно использовать для исследования локализации. Для усредненной двухчастичной функции Грина имеем

$$\langle G_{ij}(E) G_{kl}(E') \rangle \sim \delta_{ij} \delta_{kl}; \quad \delta_{ik} \delta_{jl}; \quad \delta_{il} \delta_{jk}. \quad (15)$$

Аналогичная ситуация (в другой модели) возникала в работах [14, 15].

Можно ввести калибровочно-инвариантные электронные функции Грина:

$$\mathcal{G}_{ij}^{\Gamma}(E) = \langle 0 | a_i \frac{1}{E-H} \prod_{\Gamma} U_{ki} a_j^+ | 0 \rangle, \quad (16)$$

где $\Pi_{\Gamma} U_{kl}$ определяет произведение элементов U_{kl} из (3) (или A_{kl} из (9)) вдоль произвольного пути Γ на решетке, связывающего узлы i и j . Выражение (16) очевидным образом калибровочно-инвариантно, (14) для него не имеет места. Поэтому возможно, что корреляторы типа (16) могут содержать определенную информацию о локализации, однако они явным образом зависят от пути Γ , а их поведение после усреднения не исследовано.

В то же время, как отмечено выше, стандартный подход Андерсона [4–6] оказывается вполне приспособленным к рассмотрению задач такого рода ввиду локальной калибровочной инвариантности $G_{ii}(E)$.

§ 2. Локализация в модели случайных фаз

Следуя методу Андерсона, мы исследуем сходимость перенормированного ряда теории возмущений для собственно-энергетической части $\Delta_i(E)$, входящей в диагональный по узлам матричный элемент неусредненной функции Грина:

$$G_{ii}(E) = \frac{1}{E - E_i - \Delta_i(E)}; \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \Delta_i(E) = & \sum_{k \neq i} J_{ik} \frac{1}{E - E_k - \Delta_k^i(E)} J_{ki} + \\ & + \sum_{k \neq i, l \neq ik} J_{il} \frac{1}{E - E_l - \Delta_l^{ik}(E)} J_{lk} \frac{1}{E - E_k - \Delta_k^i(E)} J_{ki} + \dots, \end{aligned} \quad (18)$$

где $\Delta_k^{ij\dots}(E)$ определяется рядом типа (18), но соответствующим гамильтониану (1), в котором положено $E_i = E_j = E_l = \dots = \infty$ [5]. В выражении (18) исключены повторяющиеся индексы узлов, т. е. в $N+1$ -м порядке по J_{ij} суммирование идет вдоль пути без пересечений Γ_N из N шагов на решетке, стартуя с i -го узла и возвращаясь в i -й узел (рис. 1, а). При этом процессы многократного рассеяния (рис. 1, б) с возвратом учтены не явно введением $\Delta_k^{ij\dots}(E)$ в знаменателях (18) [4, 5], что и позволяет рассмотреть пути без пересечений на решетке. Представление (18) является точным. Электрон с энергией E локализован, если ряд для $\Delta_i(E)$ сходится в смысле сходимости по вероятности [4, 5].

Для исследования сходимости ряда (18) рассмотрим модуль члена $N+1$ -го порядка по J_{ij} :

$$\left| \Delta_i^{(N)}(E) \right| = \left| \sum_{\Gamma_N} T_{\Gamma_N}(E) \right|, \quad (19)$$

где \sum означает суммирование по всем путям без пересечений из N шагов, стартовых и оканчивающихся в узле i , $T_{\Gamma_N}(E)$ — вклад одного такого пути. Согласно Эконому и Коэну [5], можно показать, что

$$\left| \Delta_i^{(N)}(E) \right| \approx L^N(E) = \left| \sum_{\Gamma_N} J \exp(i\Phi_{ij}) \tilde{G}_j^i(E) J \exp(i\Phi_{jk}) \tilde{G}_k^{ij}(E) \dots J \exp(i\Phi_{li}) \right|, \quad (20)$$

$$\ln \tilde{G}_k^{ij\dots l}(E) = \left\langle \ln \left| \frac{1}{E - E_k - \Delta_k^{ij\dots l}(E)} \right| \right\rangle, \quad (21)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по диагональному беспорядку (2). Величина $L^N(E)$, очевидно, калибровочно-инвариантна, что связано с замкнутостью путей Γ_N на решетке. Тогда $L(E) < 1$ представляет собой условие сходимости ряда (18) [5] и может рассматриваться как критерий локализации. Делокализованным состояниям соответствует условие $L(E) > 1$.

Выражение (21) слишком сложно для проведения конкретных вычислений, что связано с необходимостью учета вклада $\Delta_k^{ij\dots l}(E)$. Существуют различные способы обхода этой трудности [4–6], однако мы воспользуемся простейшим — полностью пренебрежем вкладом этих величин [5, 16]:

$$\bar{G}_k^{ij\dots l}(E) \approx \exp\{-\langle \ln|E - E_k| \rangle\}. \quad (22)$$

Такое приближение позволяет легко провести все вычисления, а его результаты для положения порогов подвижности и критического беспорядка

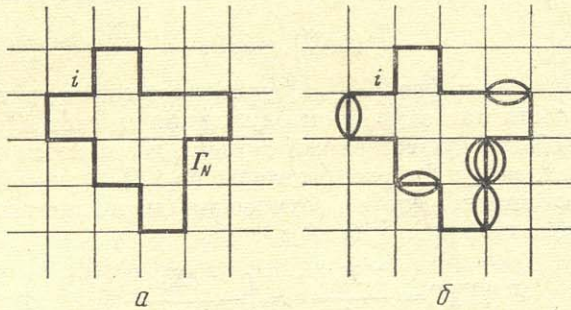


Рис. 1

не слишком сильно отличаются от результатов более аккуратного рассмотрения [4, 5, 17]. Поэтому обычно считается, что более последовательный учет $\Delta_k^{ij\dots l}(E)$ в (21) приводит просто к количественному уточнению условия локализации [5] (см., однако, обсуждение в Заключение).

Тогда имеем

$$L^N(E) \approx J^{N+1} \left| \sum_{\Gamma_N} \exp(i\Phi_{\Gamma_N}) \right| \exp\{-N\langle \ln|E - E_k| \rangle\}, \quad (23)$$

где

$$\Phi_{\Gamma_N} = \Phi_{ij} + \Phi_{jk} + \dots + \Phi_{li} \quad (24)$$

— набег фазы вдоль пути Γ_N . В (24) имеется всего N слагаемых, \sum_{Γ_N} содержит $\sim K^N$ слагаемых, где K — так называемая константа связности решетки [18]:

$$\ln K = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N,$$

где Z_N — полное число путей без пересечений из N шагов.

Рассмотрим

$$X_N = \sum_{\Gamma_N} \exp(i\Phi_{\Gamma_N}). \quad (25)$$

Если все фазы в (24) равны нулю (или фиксированы), то, очевидно, $|X_N| \sim K^N$ и соответственно получаем обычный ответ [5, 16]:

$$L^N(E) \approx J^{N+1} K^N \exp\{-N \langle \ln |E - E_k| \rangle\}, \quad (26)$$

$$L(E) \approx \alpha K \exp \mathcal{F}(E, W/J),$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}\left(E, \frac{W}{J}\right) &= \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} dE_k \ln \left| \frac{J}{E - E_k} \right| = \\ &= 1 - \frac{1}{2} \left\{ \left(1 + \frac{2E}{W}\right) \ln \left| \frac{W}{2J} + \frac{E}{J} \right| + \left(1 - \frac{2E}{W}\right) \ln \left| \frac{W}{2J} - \frac{E}{J} \right| \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Здесь $\alpha = Z/K$ (Z — число ближайших соседей) — поправочный множитель [5], позволяющий правильно описать предел регулярной решетки. Условие $L(0) = 1$ дает тогда для критического беспорядка, нужного для полной локализации

$$(W/J)_c = 2eZ. \quad (28)$$

В модели случайных фаз $|X_N|$ представляет собой длину пути, проходимаго на плоскости при случайном блуждании за счет K^N шагов единичной длины. Наиболее существенный эффект достигается при полностью случайных фазах, когда Φ_{ij} распределены по (6), причем $\Phi = 2\pi n$ ($n = 1, 2, \dots$). Тогда мы имеем дело с броуновским движением на плоскости, а $|X_N|$ распределена по Рэлею [19, 20]:

$$P(|X_N|) = \frac{2|X_N|}{K^N} \exp\left\{-\frac{|X_N|^2}{K^N}\right\}, \quad (29)$$

$$\langle |X_N|^2 \rangle = K^N. \quad (30)$$

Наиболее вероятное значение $|X_N| \sim \langle |X_N|^2 \rangle^{1/2} \sim K^{N/2}$. Тогда

$$L^N(E) \approx J^{N+1} K^{N/2} \exp\{-N \langle \ln |E - E_k| \rangle\}, \quad (31)$$

$$L(E) \approx \alpha K^{1/2} \exp \mathcal{F}(E, W/J).$$

Таким образом, стохастизация фаз приводит к уменьшению эффективной константы связности решетки. Соответственно условие полной локализации при полной случайности фаз имеет вид

$$(W/J)_c^{RPM} = 2e\alpha K^{1/2} = 2eZK^{-1/2} \quad (32)$$

Очевидно, что

$$(W/J)_c^{RPM} < (W/J)_c,$$

т. е. условие локализации облегчается.

В отсутствие диагонального беспорядка $E_k = E_0$ при всех k . Тогда в отсутствие и недиагонального беспорядка имеем [5]

$$L(E) = \alpha K \frac{J}{|E - E_0|} = Z \frac{J}{|E - E_0|}, \quad (33)$$

а при полной хаотичности фаз

$$L(E) = \alpha K^{1/2} \frac{J}{|E - E_0|} = \frac{Z}{K^{1/2}} \frac{J}{|E - E_0|}. \quad (34)$$

Тогда при $L(E) > 1$ получаем ширину зоны делокализованных состояний в модели полностью хаотических фаз:

$$B_{ext}^{RPM} = K^{-1/2} B, \tag{35}$$

где $B = 2ZJ$ — обычная ширина зоны в регулярном случае.

Таким образом, при отсутствии диагонального беспорядка полная локализация во всей зоне невозможна, всегда остается область делокализованных состояний шириной B_{ext}^{RPM} вокруг центра зоны. В табл. 1 приведены значения K и $K^{-1/2}$ для различных решеток [18]. Видно, что фазовый беспорядок во всех случаях может локализовать примерно от $1/3$ до $2/3$ исходной зоны.

Таблица 1

Решетка	Z	K	$K^{-1/2}$	$\ln K$
Треугольная	6	4,1515	0,4908	1,4235
Квадратная	4	2,6390	0,6156	0,9704
Алмаз	4	2,878	0,5896	1,0571
ПК	6	4,6826	0,4621	1,5438
ОЦК	8	6,5288	0,3914	1,8762
ГЦК	12	10,035	0,3157	2,3061

Очевидно, что в общем случае $K^{N/2} \ll |X_N| \ll K^N$. Задача вычисления статистического распределения сумм типа (25) подробно исследовалась в связи с различными задачами статистической радиотехники [19–22]. Это распределение может быть сравнительно легко найдено тогда, когда распределение величин Φ_{Γ_N} таково, что выполняется центральная предельная теорема [21, 22]. В частности,

$$P(|X_N|) = \frac{|X_N| e^{-S}}{(s_1 s_2)^{1/2}} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \varepsilon_m I_m(P) I_{2m}((Q^2 + R^2)^{1/2}) \cdot \cos \left[2m \arctg \frac{R}{Q} \right] \tag{36}$$

— так называемое распределение Накагами [22]. Здесь $I_m(x)$ — модифицированная функция Бесселя порядка m , $\varepsilon_0 = 1$, $\varepsilon_m = 2$ при $m \neq 0$,

$$S = \frac{s_1 + s_2}{4s_1 s_2} |X_N|^2 + \frac{\alpha^2}{2s_1} + \frac{\beta^2}{2s_2}, \tag{37}$$

$$P = \frac{s_1 - s_2}{4s_1 s_2} |X_N|^2, \quad Q = |X_N| \frac{\alpha}{s_1}, \quad R = |X_N| \frac{\beta}{s_2};$$

$$\alpha = \sum_{\Gamma_N} \int d\Phi_{\Gamma_N} P(\Phi_{\Gamma_N}) \cos \Phi_{\Gamma_N} \equiv \sum_{\Gamma_N} \alpha_{\Gamma_N},$$

$$\beta = \sum_{\Gamma_N} \int d\Phi_{\Gamma_N} P(\Phi_{\Gamma_N}) \sin \Phi_{\Gamma_N} \equiv \sum_{\Gamma_N} \beta_{\Gamma_N},$$

(38)

$$s_1 = \sum_{\Gamma_N} \int d\Phi_{\Gamma_N} P(\Phi_{\Gamma_N}) \cos^2 \Phi_{\Gamma_N} - \sum_{\Gamma_N} \alpha_{\Gamma_N}^2,$$

$$s_2 = \sum_{\Gamma_N} \int d\Phi_{\Gamma_N} P(\Phi_{\Gamma_N}) \sin^2 \Phi_{\Gamma_N} - \sum_{\Gamma_N} \beta_{\Gamma_N}^2,$$

где $P(\Phi_{\Gamma_N})$ — функция распределения Φ_{Γ_N} . При этом легко видеть, что [21, 22]

$$\langle |X_N|^2 \rangle = s_1 + s_2 + \alpha^2 + \beta^2, \quad (39)$$

т. е. полностью определяется средними значениями α , β и дисперсиями s_1 и s_2 из (38). Распределение Рэля (29) получается из (36) при $\alpha = \beta = 0$, $s_1 = s_2 = K^N/2$.

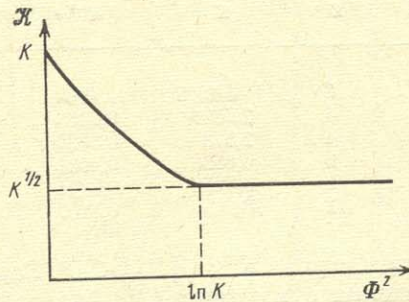


Рис. 2

Рассмотрим некоторые примеры. Начнем с гауссова случая (5). Тогда легко видеть, что

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \Phi_N} \exp\left\{-\frac{\Phi_{\Gamma_N}^2}{2\Phi_N^2}\right\}, \quad (40)$$

$$\Phi_N^2 = \langle \Phi_{ij}^2 \rangle + \langle \Phi_{jk}^2 \rangle + \dots + \langle \Phi_{in}^2 \rangle = N\Phi^2. \quad (41)$$

Из (38), (39) легко получить

$$\langle |X_N|^2 \rangle = K^{2N} \exp(-N\Phi^2) + K^N (1 - \exp(-N\Phi^2)). \quad (42)$$

В общем случае из (23) имеем

$$L(E) \approx \alpha \mathcal{K} \exp \mathcal{F}(E, W/J), \quad (43)$$

где эффективная константа связности \mathcal{K} определена как

$$\mathcal{K} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle |X_N|^2 \rangle^{1/2N}. \quad (44)$$

Соответственно для случая (40) — (42) нетрудно показать, что

$$\mathcal{K} = \begin{cases} K \exp(-\Phi^2/2), & \Phi^2 < \ln K \\ K^{1/2}, & \Phi^2 > \ln K \end{cases}. \quad (45)$$

Ход «эффективной связности» решетки от фазового беспорядка показан на рис. 2. С ростом Φ^2 \mathcal{K} сначала плавно убывает, затем при $\Phi^2 > \ln K$ происходит полная стохастизация фаз и \mathcal{K} выходит на асимптотику $K^{1/2}$.

Рассмотрим случай распределения (6) с $\Phi \neq 2\pi n$ ($n=1, 2, \dots$). Тогда, очевидно

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \begin{cases} 1/N\Phi, & |\Phi_{\Gamma_N}| < N\Phi \\ 0, & |\Phi_{\Gamma_N}| > N\Phi \end{cases} \quad (46)$$

При этом получаем

$$\mathcal{K} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ K^{2N} \frac{\sin^2 N\Phi}{(N\Phi)^2} + K^N \left(1 - \frac{\sin^2 N\Phi}{(N\Phi)^2} \right) \right\}^{1/2N} = K. \quad (47)$$

Таким образом, в этом случае не происходит даже частичной стохастизации фаз. Недиagonalный беспорядок такого типа не влияет на локализацию. Из (47) видно, что при $\Phi = \pi n$ ($n=1, 2, \dots$) мы возвращаемся к полной стохастизации, рассмотренной выше.

Аналогичным образом можно рассмотреть и случаи (7)–(9). Пусть n_{Γ_N} — число отрицательных связей вдоль данного пути Γ_N . Вероятность реализации такого распределения связей задается биномиальным распределением

$$P_N(n_{\Gamma_N}) = C_N^{n_{\Gamma_N}} c^{n_{\Gamma_N}} (1-c)^{N-n_{\Gamma_N}}. \quad (48)$$

Используя предельное поведение (48) при $N \rightarrow \infty$ и то обстоятельство, что в данном случае $\Phi_{\Gamma_N} = \pm n_{\Gamma_N} \pi$, сразу получаем

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \frac{1}{2} [2\pi^2 N c (1-c)]^{-1/2} \{ \exp[-(\Phi_{\Gamma_N} - c\pi N)^2 / 2Nc(1-c)\pi^2] + \exp[-(\Phi_{\Gamma_N} + c\pi N)^2 / 2Nc(1-c)\pi^2] \}. \quad (49)$$

Появление двух слагаемых в (49) связано с тем, что путь Γ_N может проходиться по двум направлениям обхода, набег фазы равен $\pm n_{\Gamma_N} \pi$ в силу $\Phi_{ij} = -\Phi_{ji}$ (3). Из (49) получаем

$$K = \begin{cases} K \exp[-c(1-c)\pi^2/2], & c < c_1^*, \quad c > c_2^* = (1-c_1^*), \\ K^{1/2}, & c_1^* < c < c_2^*, \end{cases}$$

где $c_{1,2}^*$ определяются как решение уравнения $c(1-c)\pi^2 = \ln K$.

Таким образом, включение достаточного числа антиферромагнитных связей ($c > c_1^*$) приводит к полной стохастизации фаз и выходу \mathcal{K} на уровень $K^{1/2}$. Значения $c_{1,2}^*$ для различных решеток приведены в табл. 2.

Таблица 2

Решетка	Треуг.	Квадр.	Алмаз	ПК	ОЦК	ГЦК
c_1^*	0,1748	0,1106	0,1220	0,1941	0,2445	0,3722
c_2^*	0,8252	0,8894	0,8780	0,8059	0,7455	0,6278

Отметим, что найденными таким способом критические концентрации очень близки к критическим концентрациям антиферромагнитных связей, при которых исчезает ферромагнетизм в соответствующих решетках Изинга [23, 24].

§ 3. Локализация в магнитном поле

Включение постоянного внешнего магнитного поля H приводит, как известно, к возникновению у интеграла переноса J_{ij} дополнительного фа-

зового множителя (фактор Пайерлса) [25, 26]

$$J_{ij}^H = \exp(-i\Phi_{ij})J_{ij}, \quad (51)$$

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{2} \frac{e}{\hbar c} \mathbf{H}[\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j],$$

где \mathbf{R}_i — радиус-вектор, определяющий положение i -го узла в решетке. Основное свойство этих факторов состоит в том [26], что сумма вдоль замкнутого пути Γ_N на решетке калибровочно-инвариантна и равна потоку магнитного поля \mathbf{H} через площадь S_{Γ_N} , охватываемую контуром Γ_N , измеренному в единицах кванта магнитного потока $\Phi_0 = \hbar c/e$:

$$\Phi_{\Gamma_N} = \Phi_{ij} + \Phi_{jk} + \dots + \Phi_{in} = \Phi_0^{-1} \mathbf{H} S_{\Gamma_N}. \quad (52)$$

Результат (51) справедлив для не слишком сильных полей, для которых можно пренебречь деформацией атомных волновых функций в магнитном поле (что меняет и модуль J_{ij}).

Теперь видно, что влияние магнитного поля на локализацию аналогично рассмотренному выше влиянию случайных фаз J_{ij} . Оно полностью определяется статистикой площадей S_{Γ_N} путей без пересечений на решетке. Насколько известно автору, задача о распределении площадей путей без пересечений никем еще не рассматривалась. По-видимому, надежные результаты здесь можно получить только с помощью машинного моделирования. Тем не менее, какова бы ни была статистика S_{Γ_N} , из предыдущего ясно, что появление фазовых множителей Φ_{Γ_N} (52) в (23) может только способствовать улучшению сходимости ряда Андерсона (в крайнем случае не влиять на нее), эффективно уменьшая константу связности решетки. Поэтому в пренебрежении спиновыми эффектами (их влияние на прыжковую проводимость рассмотрено в недавней работе Фукуямы и Иосиды [27]) магнитное поле может в этом приближении только способствовать локализации. Ниже мы проведем простой качественный анализ с целью выявления основных зависимостей и оценки масштаба явлений.

Из скэйлинговой теории путей без пересечений [28, 29] известно, что среднеквадратичный размер Γ_N

$$\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu} a^2, \quad (53)$$

где a — постоянная решетки, ν — критический индекс корреляционной длины. Тогда для качественного рассмотрения можно принять

$$\langle |S_{\Gamma_N}| \rangle \sim \pi \langle R^2 \rangle \sim \pi a^2 N^{2\nu} \quad (54)$$

в качестве оценки средней площади Γ_N .

В двумерном случае при магнитном поле, ортогональном плоскости системы, ясно, что значения Φ_{Γ_N} (52) распределены вокруг

$$\pm \mathcal{F}_0 = \pm H \langle |S_{\Gamma_N}| \rangle \sim \pi N^{2\nu} H a^2.$$

(Два знака опять связаны с двумя возможными направлениями обхода Γ_N .) Тогда функцию распределения Φ_{Γ_N} можно промоделировать двумя гауссовыми пиками:

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\sigma_N} \left\{ \exp\left[-\frac{(\Phi_{\Gamma_N} - \mathcal{F}_0)^2}{2\sigma_N^2}\right] + \exp\left[-\frac{(\Phi_{\Gamma_N} + \mathcal{F}_0)^2}{2\sigma_N^2}\right] \right\}, \quad (55)$$

где

$$\sigma_N^2 \sim f(N) H^2 a^4 / \Phi_0^2 \quad (56)$$

— дисперсия этого распределения. Относительно поведения $f(N)$ в настоящее время трудно сделать какие-либо определенные заключения, кроме того, что она, по-видимому, растет, как некоторая степень N . Кроме этого, мы предположим, что распределения площадей (т. е. и Φ_{Γ_N}) различных Γ_N независимы, что, конечно, достаточно сомнительно при рассмотрении статистики путей без пересечения.

Тогда из приведенного выше рассмотрения модели хаотических фаз сразу получаем для эффективной константы связности в магнитном поле

$$\mathcal{K} = \lim_{N \rightarrow \infty} \{K^{2N} e^{-\sigma_N^2} \cos^2 \mathcal{F}_0 + K^N [1 - e^{-\sigma_N^2} \cos^2 \mathcal{F}_0]\}^{1/2N} =$$

$$= \begin{cases} K; & \sigma_N^2 \sim N^{1-\delta} H^2 a^4 / \Phi_0^2, \\ K^{1/2}; & \sigma_N^2 \sim N^{1+\delta} H^2 a^4 / \Phi_0^2 \quad \delta > 0 \end{cases} \quad (57a)$$

$$(57b)$$

Только в случае $\sigma_N^2 \sim NH^2 a^4 / \Phi_0^2$ мы получаем

$$\mathcal{K} = \begin{cases} K \exp(-\text{const } H^2 a^4 / \Phi_0^2); & \text{const } H^2 a^4 / \Phi_0^2 < \ln K \\ K^{1/2}; & \text{const } H^2 a^4 / \Phi_0^2 > \ln K \end{cases} \quad (58)$$

т. е. поведение типа, показанного на рис. 2. При $Ha^2 \sim \Phi_0$, таким образом, происходит полная стохастизация фаз. Поведение (57a), т. е. отсутствие влияния поля на локализацию, также вполне возможно. Случай (57b) представляется маловероятным.

Заметим, что в случае (58) эффект выходит на насыщение в полях $Ha^2 \sim \Phi_0$, т. е. $H \sim 10^6$ Гс при $a \sim 3$ Å. В пределе $Ha^2 \ll \Phi_0$ из (58) следует

$$L(E) \approx \alpha K \left\{ 1 - \text{const} \frac{H^2 a^4}{\Phi_0^2} \right\} \exp \mathcal{F} \left(E, \frac{W}{J} \right), \quad (59)$$

т. е. пороги подвижности смещаются внутрь зоны квадратично по полю.

В трехмерном случае мы снова предположим факторизацию функции распределения S_{Γ_N} по различным Γ_N . Кроме того, предположим и полную хаотичность ориентаций S_{Γ_N} в пространстве, так что

$$P(S_{\Gamma_N}) = P(S_{\Gamma_N}^x) P(S_{\Gamma_N}^y) P(S_{\Gamma_N}^z). \quad (60)$$

Моделируя каждый из сомножителей в (60) простым гауссовым распределением (с равным нулю средним), для функции распределения потока через контур Γ_N получаем

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma_N} \exp \left(-\frac{\Phi_{\Gamma_N}^2}{2\sigma_N^2} \right), \quad (61)$$

где для σ_N снова предположим поведение типа (56). Тогда и в трехмерном случае получаются результаты (57) — (59).

Другое возможное приближение для $P(\Phi_{\Gamma_N})$ получается в пренебрежении дисперсией S_{Γ_N} . При этом можно считать, что все Γ_N имеют фиксированную площадь порядка (54), но направления S_{Γ_N} хаотично ориентированы в пространстве. Тогда легко получить

$$P(\Phi_{\Gamma_N}) = \begin{cases} \Phi_0 / 2H \langle |S_{\Gamma_N}| \rangle; & |\Phi_{\Gamma_N}| < H \langle |S_{\Gamma_N}| \rangle \\ 0; & |\Phi_{\Gamma_N}| > H \langle |S_{\Gamma_N}| \rangle \end{cases}, \quad (62)$$

а для эффективной связности получаем результат типа (47), т. е. магнитное поле не влияет на локализацию. Автору представляется, что наиболее

вероятным является поведение типа (58), (59), однако окончательное решение вопроса зависит от поведения дисперсии σ_N (56).

Заключение

В заключение обсудим соотношение полученных выше результатов с выводами скэйлинговой теории локализации [3, 7] и предсказаниями относительно влияния магнитного поля [9, 10]. В [7] было показано, что в двумерных системах сколь угодно малого беспорядка достаточно для полной локализации всех состояний в зоне. Хотя этот вывод и встретил определенные возражения (см. обзор [3]), он подтверждается простыми расчетами по теории возмущений в пределе слабого беспорядка [8, 9], когда $l \gg a$, где l — длина свободного пробега за счет упругого рассеяния. Аналогичные расчеты [9, 10] продемонстрировали сильное влияние магнитного поля на двумерную локализацию — возникает эффект отрицательного магнитосопротивления, т. е. поле разрушает локализацию. В связи с этими результатами возникает вопрос о физическом смысле двумерных порогов подвижности, получающихся при стандартном подходе Андерсона [4, 5], а также о смысле полученного выше вывода о том, что магнитное поле может только способствовать локализации (в крайнем случае не влиять на нее).

Отметим прежде всего, что, несмотря на полную локализацию, двумерные пороги подвижности согласно [7] сохраняют определенный физический смысл пороговых энергий, отделяющих квазиметаллическую область энергий в двумерных системах от диэлектрической. При прохождении энергии Ферми через эти пороги должен происходить достаточно резкий переход от квазиметаллической проводимости к прыжковой [3]. Эффекты локализации в «квазиметаллической» области связаны [7, 8] с сингулярным поведением особого класса диаграмм теории возмущений (графики Лангера — Нила [30]). В стандартном подходе Андерсона [4, 5] аналогом таких процессов, по-видимому, являются процессы многократного перерассеяния с возвратом (рис. 4, б), дающие вклад в собственно-энергетические части $\Delta_k^{ijl\dots}(E)$. Пренебрежение такими вкладами или недостаточно корректный учет их в обычном подходе [4, 5] не позволяет получить слабые (логарифмические) эффекты полной локализации в квазиметаллической области двумерных систем.

Вместе с тем вклад диаграмм Лангера — Нила весьма чувствителен к магнитному полю (а также к рассеянию на магнитных примесях) [9, 10]. Весьма слабого поля достаточно для выключения таких процессов рассеяния, т. е. для разрушения локализации в квазиметаллической области, что и приводит [9, 10] к эффекту отрицательного магнитосопротивления. Однако даже при полном пренебрежении процессами Лангера — Нила по мере роста беспорядка в системе возможна обычная локализация Андерсона, возникающая при $l \sim a$. В двумерной зоне системы, находящейся в магнитном поле, при достаточно сильном беспорядке (и поле) существуют обычные пороги подвижности, поведение которых и рассматривалось выше.

Из сказанного ясно, что результаты [9, 10] и данной работы относятся к различным областям изменения магнитного поля. В частности, переписывая оценки критического поля из [9, 10], в наших обозначениях получаем, что эффект отрицательного магнитосопротивления выходит на насыщение ($\sim \ln H$) в полях $Ha^2/\Phi_0 \sim (a/l)^2$ при температуре $T=0$ или в полях $Ha^2/\Phi_0 \sim a^2/l_{in}$ при $T \neq 0$, где l_{in} — длина свободного пробега за счет процессов неупругого рассеяния. В силу используемого в [9, 10] условия

$a \ll l \ll l_n$ ($T \rightarrow 0$) видно, что $Ha^2 \ll \Phi_0$. Типичные значения критического поля в [9, 10] порядка 10–100 Гс. В то же время обсуждавшиеся выше эффекты имеют характерный масштаб $Ha^2 \ll \Phi_0$ и выходят на насыщение при $Ha^2 \sim \Phi_0$, т. е. относятся к области полей $H \sim 10^4$ – 10^6 Гс, где они должны приводить к положительному магнитосопротивлению (в случае поведения типа (576) это может произойти раньше). Заметим, что эффекты положительного магнитосопротивления содержатся неявно и в [9, 10] через зависимость от магнитного поля классического коэффициента диффузии.

В заключение автор выражает глубокую признательность М. В. Медведеву и Д. Е. Хмельницкому за ценные обсуждения, а также Б. И. Шкловскому за интерес к данной работе.

Литература

1. Thouless D. J. Phys. Reports, 1974, 13, 93.
2. Эфрос А. Л. УФН, 1978, 126, 41.
3. Садовский М. В. УФН, 1981, 133, 223.
4. Anderson P. W. Phys. Rev. 1958, 109, 1492.
5. Economou E. N., Cohen M. H. Phys. Rev., 1972, B5, 2932.
6. Antoniou P. D., Economou E. N. Phys. Rev., 1977, B16, 3768.
7. Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello D. C., Ramakrishnan T. V. Phys. Rev. Lett., 1979, 42, 673.
8. Горьков Л. П., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е. Письма ЖЭТФ, 1979, 30, 248.
9. Altshuler B. L., Khmel'nitzkii D. E., Larkin A. I., Lee P. A. Phys. Rev. 1980, B22, 5142.
10. Hikami S., Larkin A. I., Nagaoka Y. Prog. Theor. Phys., 1980, 63, 707.
11. Toulouse G. Comm. Phys., 1977, 2, 115.
12. Fradkin E., Huberman B., Shenker S. H. Phys. Rev., 1978, B18, 4789.
13. Schuster H. G. Zs. Phys., 1979, B35, 163.
14. Wegner F. J. Phys. Rev., 1979, B19, 783.
15. Opperman R., Wegner F. J. Zs. Phys., 1979, B34, 327.
16. Ziman J. M. J. Phys., 1969, C2, 1230.
17. Licciardello D. C., Economou E. N. Phys. Rev., 1975, B11, 3697.
18. Shante V. K. S., Kirkpatrick S. Adv. Phys., 1971, 20, 325.
19. Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники. М.: Советское радио, 1969.
20. Рыков С. М. Введение в статистическую радиофизику, ч. 1. М.: Наука, 1976.
21. Beckmann P. J. Res. NBS, 1962, 66D (Radio Propagation), 231.
22. Beckmann P. J. Res. NBS, 1964, 68D (Radio Science), 927.
23. Kirkpatrick S. Phys. Rev., 1977, B16, 4630.
24. Medvedev M. V. Phys. Stat. Sol. (b), 1978, 86, 109.
25. Peierls R. Zs. Phys., 1933, 80, 763.
26. Friedmann L. Phil. Mag., 1978, 38, 467.
27. Fukuyama H., Yosida K. J. Phys. Soc. Japan, 1979, 46, 102.
28. de Gennes P. G. Phys. Lett., 1972, 38A, 339.
29. des Cloizeaux J. Phys. Rev., 1976, A10, 1665.
30. Langer J. S., Neal T. Phys. Rev. Lett., 1966, 16, 984.