РАЗЛИЧИЕ МЕЖДУ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ И ПРОВОДЯЩИМ СОСТОЯНИЯМИ

Е. К. Кудинов

В качестве базисного свойства, определяющего различие между диэлектриком и проводником, предлагается использовать статическое явление — эффект поля, который отсутствует в диэлектрике, но имеется в проводнике. Отсутствие или наличие эффекта поля тесно связано с характером однородного линейного отклика на постоянное электрическое поле: в случае диэлектрика этот отклик конечен, для проводника он зависит от объема V и при $V \to \infty$ стремится к бесконечности. Флуктуационно-диссипационная теорема позволяет связать характер упомянутого отклика со среднеквадратичной флуктуацией дипольного момента $\langle d^2 \rangle$. В диэлектрике величина $(\langle d^2 \rangle / V)_{V \to \infty}$ конечна, в проводнике — бесконечна. Таким образом, для выяснения, является ли данное состояние диэлектрическим или проводящим, достаточно исследовать (в области температур, близких к $T=0$) величина $\langle d^2 \rangle$. Это в свою очередь сводится к задаче о поведении среднеквадратичной флуктуации числа носителей $\langle \Delta N^2 \rangle$ и их статической парной корреляционной функции. Подход иллюстрируется рядом примеров. В частности, рассмотрено диэлектрическое состояние в модели Хаббарда.

Зонная модель смогла описать как проводящее, так и диэлектрическое состояние кристалла в терминах степени заполнения зон в рамках картины невзаимодействующих электронов. Однако еще в 1937 г. было замечено, что целый ряд кристаллов-диэлектриков не может быть ею описан [1]. В настоящее время известно большое количество таких веществ. Это соединения металлов с частично заполненными d- или f-оболочками, в них соответствующие зоны заполнены лишь частично [2-5]. С конца 50-х годов эти вещества интенсивно изучаются в связи с обнаружением в них ряда специфических свойств (наличие магнитных и структурных переходов, перехода диэлектрик—проводник, смешанная валентность, эффекты, связанные с «тяжелыми» фермионами и т. п.). Особо следует отметить, что высокотемпературные сверхпроводники относятся к этому классу.

Мотт дал качественное объяснение диэлектрической природы таких веществ [6, 7]. Если перекрытие (d- или f-орбит мало, электроны следует описывать локализованными на узлах функциями (типа атомных), тогда кулоновское отталкивание приводит к эффективному притяжению локализованных электрона и дырки, которые могут образовать электрически нейтральное связанное состояние (не переносят тока). Образование токовых возбуждений связано с ионизацией такого состояния (конечная энергия активации), что и обусловливает диэлектрический характер состояния (моттовский диэлектрик). Очевидно, что в этой картине взаимодействие электронов играет определяющую роль, соответствующая модель принципиально отлична от зонной. Таким образом, имеются (по крайней мере) две существенно различающиеся модели диэлектрика и естественно возникает вопрос, как сформулировать критерий отличия диэлектрика от проводника (КДП) в общем случае (не используя модельных представлений).

Предложенная в 1964 г. Хаббардом модель, в которой учитывалось только одноузельное кулоновское отталкивание [8, 9], инициировала огромное количество работ (например, [10–14]), поскольку казалось, что простота вида гамильтониана Хаббарда позволит описать не только диэлектрическое и проводящее состояния, но и переход между ними (переход Мотта). При этом, однако, выяснилось, что получаемые результаты трудно поддаются интерпретации именно из-за отсутствия КДП в общей его форме (заметим, что в качестве КДП нередко предлагались недостаточно обоснованные утверждения).

Очевидно, что КДП должен отражать специфику основного состояния системы ($T=0$). Предложенные к настоящему времени КДП можно свести к двум типам: 1) наличие щели в спектре токовых возбуждений (запрещенная зона зонной теории, положительная энергия для возбуждения пары двойка—дырка в моттовском диэлектрике); 2) подход на основе формулы Кубо для комплексной поляризуемости $\varkappa(\omega)$: проводник характеризуется особенностью $\varkappa(\omega)$ при $\omega\to 0$ [5, 15, 16]. 1) основан на свойствах спектра возбуждений и может быть использован только в рамках конкретной, достаточно обозримой модели. Недостатком 2) является то, что надлежащая характеристика основного состояния определяется реакцией на внешнее возмущение, т. е. требует рассмотрения задачи более высокого ранга — кинетической. В данной работе предлагается КДП, базирующийся исключительно на статических характеристиках основного состояния.

1. Качественное рассмотрение

Наш подход основан на существенном различии линейного отклика диэлектрика и проводника (при достаточно низких температурах) на постоянное однородное электрическое поле $\mathbf{E}$. В случае диэлектрика конечного объема V поле внутри тела конечно и индуцирует дипольный момент в единичном объеме $\mathbf{P}=\varkappa_0\mathbf{E}$, где поляризуемость единицы объема $\varkappa_0$ конечна и не зависит от V. В проводнике же при этом происходит перераспределение заряда и равновесию соответствует пространственно-неоднородное распределение заряда, полностью ликвидирующее действующее поле в объеме (эффект поля). При этом корректно поставленная задача о таком отклике должна с самого начала учитывать эту неоднородность.

Однако формально можно вычислить такой отклик в обоих случаях в предположении, что конечное состояние однородно (однородный линейный отклик (ОЛО)). В случае диэлектрика такое предположение корректно и мы получим разумную величину $\varkappa_0$. Но соответствующее вычисление для проводника должно выявить некорректность постановки задачи в виде «аномальности» выражения для $\varkappa_0$. Для идеального заряженного Ферми-газа нетрудно получить

$$\varkappa_0=-\frac{e^2}{V}\sum_{\mathbf{kk}'}|x_{\mathbf{kk}'}|^2\frac{n_{\mathbf{k}}-n_{\mathbf{k}'}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'}}, \tag{1}$$

$x_{\mathbf{kk}'}$ — матричные элементы координаты x между состояниями с волновыми векторами $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ ($x_{\mathbf{kk}}=0$, это соответствует нейтральности системы в целом), $\varepsilon_{\mathbf{k}}=\hbar^2k^2/2m$, $n_{\mathbf{k}}$ — распределение Ферми. Простое вычисление дает при $T=0$

$$\varkappa_0=\frac{1}{10\pi^2}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{2/3}\frac{k_c}{r_{\text{Б}}}V^{2/3}+\frac{1}{k_cr_{\text{Б}}}O(V^0), \tag{2}$$

$r_{\text{Б}}=\hbar^2/me^2$, k_c — импульс Ферми, $(r_{\text{Б}}/k_c)^{1/2}$ — радиус экранирования Томаса—Ферми. Указанная «аномалия» проявляется в зависимости $\varkappa_0$ от объема, т. е. $\varkappa_0\to\infty$ при $V\to\infty$ (подобная аномалия $\sim V^{2/3}$ получается и для сверхпроводника в модели БКШ). Соответствующее выражение для зонного диэлектрика при $T=0$ дает $\varkappa_0$, не зависящее от V, — эффект поля отсутствует (при $T=0$ появляется аномальный вклад типа (2), пропорциональный $\exp(-E_g/kT)$; E_g — ширина запрещенной зоны).

Так как поляризуемость выражается через коррелятор дипольного момента $\langle d(t)\, d\rangle$ ($d \equiv d_x$), можно ожидать, что аномалия проявится и в соответствующей статической величине — среднеквадратичной флуктуации дипольного момента $\langle d^2\rangle$ (полагаем, что сегнетоэлектрическое упорядочение отсутствует, $\langle d\rangle=0$): при $T \to 0$ для диэлектрика $\langle d^2\rangle \sim V$, для проводника $\langle d^2\rangle \sim V^{1+\gamma}$, где $\gamma > 0$.

В пределе $V \to \infty$ представляется разумным распределить все вещества между двумя классами по характеру их ОЛО: 1) $\varkappa_0$ конечна (диэлектрик, 2) $\varkappa_0$ бесконечна (проводник), т. е. в основу разделения положить отсутствие или наличие эффекта поля. Это согласуется с наличием полюса при $\omega=0$ у комплексной поляризуемости проводника [17]. В соответствии с условием причинности полюсной вклад в $\varkappa(\omega)$ должен иметь вид

$$\mathrm{const}\, \frac{i}{\omega + i\delta} = \mathrm{const} \left(\pi\delta(\omega) + i\, \frac{\mathscr{P}}{\omega}\right)$$

($\mathscr{P}$ — символ главного значения), т. е. формально $\varkappa_0=\varkappa'(0)=\infty$ (именно $\varkappa'(0)$, а не $\varkappa'(\omega)\,|_{\omega\to 0}$). Можно предположить, что класс 1 характеризуется конечным значением $\lim\limits_{V\to\infty}(\langle d^2\rangle V^{-1})$ при $T \to 0$, а класс 2 — бесконечным его значением, т. е. в случае 1) d флуктуирует нормально, в случае 2) — аномально. Далее показано, что это предположение следует из флуктуационно-диссипационной теоремы (ФДТ).

2. Связь характера статического однородного отклика и статических флуктуаций дипольного момента

Поскольку различие между диэлектриком и проводником определяется спецификой их основных состояний, далее везде рассматривается область столь низких температур, что вкладом от «щелевых» мод $e^{-E/kT}$, $E > 0$ можно пренебречь.

Запишем ФДТ для $\varkappa(\omega)$ в форме соотношения Каллена—Вельтона [17]

$$\frac{\hbar}{\pi}\varkappa''(\omega)\,\mathrm{cth}\,\frac{\hbar\omega}{2kT} = \left\{\frac{1}{V}\sum_{mn} e^{-E_n/kT}\,|d_{nm}|^2[\delta(\omega-\omega_{nm})+\delta(\omega+\omega_{nm})]\right\}_{V\to\infty},$$

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}, \tag{3}$$

E_n — энергия стационарного состояния системы с номером n. (Так как ФДТ предполагает непрерывность энергетического спектра системы, то подразумевается выполненным предельный переход $V \to \infty$). Интегрируя правую часть (3) по ω в пределах $0, \infty$, имеем

$$\int_0^\infty d\omega \left\{\frac{1}{V}\sum e^{-E_n/kT}\,|d_{nm}|^2[\delta(\omega-\omega_{nm})+\delta(\omega+\omega_{nm})]\right\}_{V\to\infty} =$$

$$= \left(\frac{1}{V}\sum e^{-E_n/kT}\,|d_{nm}|^2\right)_{V\to\infty} = \lim_{V\to\infty}(\langle d^2\rangle V^{-1}). \tag{4}$$

Таким образом, если d флуктуирует нормально, интеграл $\int\limits_0^\infty$ от левой части (3) сходится, а если d флуктуирует аномально — расходится. Это справедливо при сколь угодно малых T. Единственной особой точкой $\varkappa''(\omega)$ может быть только $\omega=0$, поэтому вопрос о сходимости упомянутого интеграла определяется поведением $\varkappa''(\omega)$ при $\omega \to 0$.[1] Рассмотрим сначала два предельных случая.

[1] При $\omega \to \infty$ для $\varkappa''$ гарантировано убывание $\sim \omega^{-2}$, обеспечивающее сходимость на верхнем пределе [17].

а) Нормальный диэлектрик (сюда в нашем понимании относится и собственный полупроводник), $\varkappa''(\omega)$ аналитична по ω. Интеграл

$$J(T)=\int_0^\infty \varkappa'' \operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,d\omega$$

сходится и при $T\to\infty$ стремится к конечному пределу $\int_0^\infty \varkappa'' d\omega$. Из этого следует, что во всей рассматриваемой области температур d флуктуирует нормально. При этом статическая поляризуемость конечна в силу сходимости интеграла в соотношениях Крамерса—Кронига

$$\varkappa'(0)=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\varkappa''(\zeta)\frac{\mathcal{P}}{\zeta}\,d\zeta, \tag{5}$$

б) Нормальный металл. В этом случае $\varkappa(\omega)$ имеет полюсной член

$$\varkappa(\omega)=\bar{\varkappa}(\omega)+\frac{i\sigma_0}{\omega+i\delta}, \qquad (\delta>0,\ \delta\to 0), \tag{6}$$

$\bar{\varkappa}$ не имеет особенности, σ_0 — статическая проводимость. (Полагаем, что σ_0 не зависит от T). Интеграл $J(T)$ расходится при всех T, включая $T=0$. Поэтому d флуктуирует аномально. Из (6) следует, что при этом $\varkappa'(\omega)$ содержит сингулярный член $\pi\sigma_0\delta(\omega)$, т. е. ОЛО аномален, $\varkappa'(0)=\infty$.

Можно описать формально плавный переход от диэлектрика к металлу, представив $\varkappa''(\omega)$ в виде $\bar{\varkappa}''(\omega)+\varkappa_c''(\omega)$

$$\varkappa_c''(\omega)=a\frac{\omega}{|\omega|}|\omega|^\alpha, \quad 1\geqslant\alpha\geqslant -1 \tag{7}$$

($a>0$), $\alpha=1$ — диэлектрик, $\alpha=-1$ — металл. Перепишем интеграл от левой части (3) так

$$J(T)=\int_0^\infty \varkappa''\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}\,d\omega=\int_0^\infty \varkappa''\left(\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}-1\right)d\omega+\int_0^\infty \varkappa'' d\omega. \tag{8}$$

Полагаем, что a, α не зависят от T. Тогда при $T\to 0$ для (8) имеем

$$J=a\int_0^\infty \omega^\alpha\left(\operatorname{cth}\frac{\hbar\omega}{2kT}-1\right)d\omega+\int_0^\infty \varkappa'' d\omega=a\left(\frac{2kT}{\hbar}\right)^{1+\alpha}\int_0^\infty x^\alpha(\operatorname{cth}x-1)\,dx+\int_0^\infty \varkappa'' d\omega. \tag{9}$$

1) При $\alpha>0$ $J(T\to 0)$ стремится к конечной величине $\int_0^\infty \varkappa'' d\omega$; $(\langle d^2\rangle/V)_\infty$ и (согласно (7)) $\varkappa_0=\varkappa'(0)$ конечны (включая $T=0$).

2) При $0>\alpha>-1$ J равен ∞ при всех конечных T (из рассматриваемой области), флуктуации d при $T\neq 0$ аномальны, $\varkappa_0=\infty$ при всех T, включая $T=0$ ($\sigma_0=0$ в этой области значений α). Итак, мы видим, что в области $\alpha>0$ ОЛО имеет диэлектрический характер ($\varkappa_0$ конечна), при этом и $(\langle d^2\rangle/V)_\infty$ конечна. При $\alpha<0$ ОЛО соответствует $\varkappa_0=\infty$ (эффект поля) и $(\langle d^2\rangle/V)_\infty=\infty$ при конечной T (а при $\alpha=-1$ и при $T=0$).[2] Это обосновывает высказанное в конце раздела 1 предположение об однозначном соответствии характера статической диэлектрической реакции $\varkappa_0$ и характера флуктуаций d. Кинетическая характеристика $\varkappa''(\omega)$ играет

---

[2] В случае $-1<\alpha<0$ в правой части (9) имеется выражение $\sim T^{1+\alpha}\cdot\infty$, и мы не смогли найти корректного перехода к $T=0$, который бы определил $(\langle d^2\rangle/V)_{T=0}$.

роль лишь «промежуточного звена», связывающего обе упомянутые статические характеристики.

Проведенное рассмотрение обосновывает разделение веществ на два класса (см. предыдущий раздел). Класс 1 соответствует $\alpha > 0$, класс 2 соответствует $-1 < \alpha < 0$, а характер диэлектрической реакции $\varkappa_0$ однозначно связан с поведением $\langle d^2 \rangle / V$ при $V \to \infty$. Физически это разделение можно интерпретировать так: в случае «1» электроны движутся финитно, поэтому эффект поля отсутствует. В случае «2» их движение инфинитно, они могут перемещаться на макроскопические расстояния, что необходимо для эффекта поля.[3]

Область значений α, промежуточных между 1 и -1, может, по-видимому, реализоваться лишь в окрестности перехода диэлектрик—проводник (такой переход через возникновение точки ветвления есть, вероятно, наиболее «плавный» переход такого рода). В большинстве задач достаточно учитывать лишь предельные случаи $\alpha = 1$ (диэлектрик) и $\alpha = -1$ (проводник). При этом основной критерий — характер статических флуктуаций — сохраняет смысл и для идеальных (неэргодических) моделей (например, моделей невзаимодействующих частиц).

3. Статические флуктуации дипольного момента

Преобразуем выражение для $\langle d^2 \rangle$ к более наглядному виду. Рассмотрим для простоты случай однородного электронного газа в конечном объеме V. Оператор дипольного момента $\hat{d} \equiv \hat{d}_x$ есть

$$\hat{d} = \int\limits_V x \hat{n}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}, \quad \hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_\sigma \psi_\sigma^+(\mathbf{r}) \psi_\sigma(\mathbf{r}), \tag{10}$$

ψ_σ^+, ψ_σ — полевые Ферми-операторы, σ — проекция спина. Система координат выбрана так, что $\int\limits_V x d\mathbf{r} = 0$ (условие нейтральности — начало координат выбрано в точке, где дипольный момент положительных зарядов равен 0). Имеем

$$\frac{1}{V} \langle \hat{d}^2 \rangle = \frac{1}{V} \int\limits_V x x' \langle \Delta \hat{n}(\mathbf{r}) \Delta \hat{n}(\mathbf{r}') \rangle d\mathbf{r} d\mathbf{r}',$$

$$\Delta \hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{n}(\mathbf{r}) - n, \quad n = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle. \tag{11}$$

Известно, что коррелятор плотности $\langle \Delta \hat{n}(\mathbf{r}) \Delta \hat{n}(\mathbf{r}') \rangle$ содержит δ-образную особенность [18].[4] Ее можно выделить, записав

$$\langle \Delta \hat{n}(\mathbf{r}) \Delta \hat{n}(\mathbf{r}') \rangle = n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_\sigma^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_\sigma(\mathbf{r}) \rangle - n^2. \tag{12}$$

Обозначаем

$$K(\mathbf{r}\mathbf{r}') = \sum_{\sigma\sigma'} \langle \psi_\sigma^+(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^+(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \psi_\sigma(\mathbf{r}) \rangle - n^2. \tag{13}$$

$K(\mathbf{r}\mathbf{r}')$ стремится к 0 при $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to \infty$, также $K(\mathbf{r}\mathbf{r}') = K(\mathbf{r}'\mathbf{r})$. Тогда

$$\frac{1}{V} \langle \hat{d}^2 \rangle = n \frac{1}{V} \int\limits_V x^2 d\mathbf{r} + \frac{1}{V} \int\limits_V x x' K(\mathbf{r}\mathbf{r}')\, d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \tag{14}$$

Подставим в (14) $xx' = -{}^1/_2 (x - x')^2 + {}^1/_2 (x^2 + x'^2)$,

$$\frac{\langle \hat{d}^2 \rangle}{V} = \frac{n}{V} \int\limits_V x^2 d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int\limits_V \left(x^2 + x'^2\right) K(\mathbf{r}\mathbf{r}')\, d\mathbf{r} d\mathbf{r}' - \frac{1}{2V} \int\limits_V (x - x')^2 K(\mathbf{r}\mathbf{r}')\, d\mathbf{r} d\mathbf{r}', \tag{15}$$

[3] При $\alpha > -1$ $\sigma_0 = 0$, но это означает лишь, что случайное блуждание имеет немарковский характер.

[4] Чтобы правильно это учесть, надо всегда переходить к нормальному упорядочению полевых операторов.

а $\int_V K(\mathbf{rr}')\,d\mathbf{r}'$ можно привести к виду

$$\int_V K(\mathbf{rr}')\,d\mathbf{r}' = \sum_\sigma \langle \psi_\sigma^+(\mathbf{r})\,\hat{N}\psi_\sigma(\mathbf{r})\rangle - Vn^2. \tag{16}$$

$\hat{N} = \sum_\sigma \int_V \psi_\sigma^+\psi_\sigma d\mathbf{r}$ — оператор полного числа частиц (в объеме V), т. е.

$$\int_V K(\mathbf{rr}')\,d\mathbf{r}' = \langle \hat{n}(\mathbf{r})\,\hat{N}\rangle - n - Vn^2. \tag{17}$$

Ввиду однородности системы $\langle \hat{n}(\mathbf{r})\hat{N}\rangle$ не зависит от $\mathbf{r}$, следовательно, он равен

$$\langle \hat{n}(\mathbf{r})\,\hat{N}\rangle = \frac{1}{V}\langle \hat{N}^2\rangle. \tag{18}$$

Окончательно получаем

$$\frac{\langle \hat{d}^2\rangle}{V} = \frac{\langle \Delta\hat{N}^2\rangle}{V}\int_V x^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2V}\int_V (x-x')^2 K(\mathbf{rr}')\,d\mathbf{r}d\mathbf{r}', \quad \Delta\hat{N} = \hat{N} - N, \quad N = \langle \hat{N}\rangle. \tag{19}$$

Первый член правой части (19) имеет порядок $V^{2/3}$ (в предположении, что $\hat{N}$ флуктуирует нормально, т. е. вдали от точки перехода I рода). Он имеет простой смысл: это флуктуации дипольного момента системы заряженных частиц в предположении, что малые макрообъемы статистически независимы и получается из элементарных соображений. Второй же имеет аномальный характер, если функция корреляции $K(\mathbf{rr}')$ недостаточно быстро убывает при $(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \to \infty$.

Есть основания полагать, что в нормальной системе при $T=0$ всегда $\langle \Delta\hat{N}^2\rangle = 0$, т. е. первый член в (19) при $T=0$ исчезает. Действительно, «нормальная» система описывается распределением Гиббса, т. е. матрицей плотности $\rho = \mathrm{const}\cdot\exp[-(\hat{H}-\mu\hat{N})/kT]$. При $T=0$ система будет находиться в состоянии Φ_0, соответствующем минимальному собственному значению оператора $\hat{\Omega} = \hat{H} - \mu\hat{N}$ (при заданном μ). Поскольку $\hat{N}$ является интегралом движения, число частиц является хорошим квантовым числом, т. е. все собственные состояния $\hat{\Omega}$, в том числе и Φ_0, являются состояниями с заданным числом частиц. Поэтому в каждом таком состоянии, в том числе и в Φ_0, дисперсия числа частиц равна нулю $\langle \Delta\hat{N}^2\rangle = 0$, т. е. отлична от нуля $\langle \Delta\hat{N}^2\rangle$ может быть только за счет разброса по различным квантовым состояниям. Но при $T=0$ система находится в единственном — основном — состоянии, следовательно, $\langle \Delta\hat{N}^2\rangle_{T=0} = 0$.

В случае возникновения дальнего порядка распределение Гиббса уже не описывает состояния системы (истинная функция распределения определяется введением бесконечно малых членов в гамильтониан, нарушающих исходную симметрию). Флуктуации при $T=0$ определяются спецификой состояния с нарушенной симметрией.

Представление $\langle \hat{d}^2\rangle/V$ в форме (19) может быть получено и для пространственно-периодической системы (точнее, такую форму имеют члены в $\langle \hat{d}^2\rangle$, ответственные за появление аномальных флуктуаций), а также при правдоподобных предположениях и для неупорядоченной системы. Оно сводит задачу о флуктуациях d к нахождению $\langle \Delta\hat{N}^2\rangle$ и определению поведения корреляционной функции $K(\mathbf{rr}')$.

4. Примеры

а) Идеальный заряженный Ферми-газ. Для него

$$\langle \Delta\hat{N}^2\rangle = -kTn^2\left(\frac{\partial V}{\partial P}\right)_T.$$

Поскольку его сжимаемость конечна, при $T=0$ первый член в (19) равен 0. Функция $K(\mathbf{rr}')$ хорошо известна [18], ее главный член при $T=0$

$$K(\mathbf{rr}')=K(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=-\frac{3n}{2\pi^2 k_c}\frac{\cos^2 k_c|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^4}. \tag{20}$$

(Заметим, что $K<0$). Видно, что при $T=0$ флуктуации d аномальны,

$$\left.\frac{\langle \hat{d}^2\rangle}{V}\right|_{T=0}\sim V^{1/3}. \tag{21}$$

При повышении T убывание K становится экспоненциальным, зато вступает в игру член $\langle\Delta\hat{N}^2\rangle$, что дает аномалию $V^{2/3}$. Отметим, что причиной степенно́й зависимости (20) является Ферми-сингулярность (ступенька). Отталкивательное взаимодействие сохраняет эту сингулярность, поэтому такое взаимодействие не изменит характера сингулярности при $T=0$. Конечность температуры размывает эту сингулярность, приводя к экспоненциальному убыванию $K(\mathbf{rr}')$.

б) Зонный диэлектрик. Здесь опять $\langle\Delta\hat{N}^2\rangle=0$ при $T=0$ (в соответствии со сказанным в конце предыдущего раздела). При конечной температуре $\langle\Delta\hat{N}^2\rangle\sim e^{-E_g/kT}$, т. е. в рассматриваемой области T этим членом следует пренебречь. Корреляционная функция $K(\mathbf{rr}')$ при $T=0$ убывает экспоненциально (это следует из-за отсутствия особенности внутри зоны Бриллюэна вследствие равномерного заполнения зон). Поэтому d флуктуирует нормально, включая $T=0$.

в) Сверхпроводник. Реализация специфического для сверхпроводника порядка (ODLRO) требует наличия флуктуаций $\hat{N}$ в основном состоянии.[5] (В отличие от «нормальных» систем «а», «б», где флуктуации $\hat{N}$ имеют термодинамическую природу, в сверхпроводнике флуктуации являются квантовыми и отличны от нуля в основном состоянии). Для модели БКШ имеем

$$\left.\frac{\langle\Delta\hat{N}^2\rangle}{V}\right|_{T=0}=\frac{4}{V}\sum_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}^2v_{\mathbf{k}}^2=\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\frac{\Delta^2}{(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)^2+\Delta^2}, \tag{22}$$

Δ — щель. В соответствии с (19) при $T=0$ $\langle\hat{d}^2\rangle/V\sim V^{2/3}$. Как нетрудно убедиться, функция корреляции убывает экспоненциально, поскольку зависящие от $\mathbf{k}$ знаменатели типа $\sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu)^2+\Delta^2}$ аналитичны при вещественных $\mathbf{k}$ и нигде не обращаются в нуль (для бесщелевой сверхпроводимости и триплетных спариваний возможно появление степенно́й зависимости).

Итак, простейшие модели согласуются с предложенным здесь КДП.

5. Модель Хаббарда

Модель Хаббарда дает нетривиальный пример использования сформулированного здесь критерия различия между диэлектриком и проводником.

Гамильтониан Хаббарда для невырожденных орбитальных состояний имеет вид

$$H=\sum_{\mathbf{mm}'\sigma}J(\mathbf{m}-\mathbf{m}')a_{\mathbf{m}\sigma}^{+}a_{\mathbf{m}'\sigma}+U\sum_{\mathbf{m}}\hat{n}_{\mathbf{m}\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{m}\downarrow}\equiv W+H_0, \tag{23}$$

$U>0$. Полагаем, что число электронов равно числу узлов N. Решетку узлов считаем центросимметричной. Задание гамильтониана в форме (23) предполагает определенный выбор полевых Ферми-операторов в виде $\psi_\sigma(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{m}}\varphi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})a_{\mathbf{m}\sigma}$, где $\{\varphi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\}$ — набор N ортонормированных орбиталей, каждая локализована на данном узле решетки $\mathbf{m}$.[6] (При этом J и U определяются однозначно). Оператор плотности $\hat{n}(\mathbf{r})$ есть

[5] В боголюбовском Бозе-газе при $T=0$ также $\langle\Delta\hat{N}^2\rangle\neq 0$.

[6] Полагаем, что при $|\mathbf{r}-\mathbf{m}|\to\infty$ $\varphi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ убывает экспоненциально.

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \psi_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'\sigma} \varphi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{m}'}(\mathbf{r}) a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma}, \tag{24}$$

а коррелятор плотности

$$\langle \Delta\hat{n}(\mathbf{r}) \Delta\hat{n}(\mathbf{r}') \rangle = \sum \varphi_{m_1}(\mathbf{r}) \varphi_{m_2}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{m}_3}(\mathbf{r}') \varphi_{\mathbf{m}_4}(\mathbf{r}') \langle a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}_2\sigma} a_{\mathbf{m}_3\sigma'}^{+} a_{\mathbf{m}_4\sigma'} \rangle - \\ - n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}'),$$

$$n(\mathbf{r}) = \langle \hat{n}(\mathbf{r}) \rangle = \sum \varphi_{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{m}'}(\mathbf{r}) \langle a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma} \rangle. \tag{25}$$

Будем учитывать только ближайших соседей, $J(\mathbf{m}-\mathbf{m}')=J$, $\mathbf{m}-\mathbf{m}'=\mathbf{g}$; $\mathbf{g}$ — вектор, соединяющий ближайшие соседние узлы. Считаем перекрытие малым $J/U \ll 1$ и рассмотрим область температур $J^2/U \ll kT \ll U$. Тогда можно пренебречь спиновым упорядочением, а также образованием реальных двоек и дырок (щелевыми возбуждениями). В этой области состояние системы можно описать с точностью до $(J/U)^2$ волновой функцией[7]

$$\Phi = e^{i\hat{S}} \Phi_0 \simeq \left(1 + i\hat{S} - \frac{1}{2}\hat{S}^2\right)\Phi_0, \tag{26}$$

где

$$\hat{S} = -i \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'\sigma} \frac{J(\mathbf{m}-\mathbf{m}')}{U} (\hat{n}_{\mathbf{m}-\sigma} - \hat{n}_{\mathbf{m}'-\sigma}) a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma}, \tag{27}$$

Φ_0 — функция гомеополярного состояния $\left(\sum_{\sigma} \hat{n}_{\mathbf{m}\sigma}\Phi_0 = \Phi_0\right)$ с произвольной спиновой конфигурацией; $e^{i\hat{S}}$ — унитарный оператор, исключающий в (23) член первого порядка по J/U. Найдем коррелятор (25) с точностью до $(J/U)^2$. Преобразуем оператор $a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma}$ в (25) с помощью (27)

$$a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma} \to a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma} + i[\hat{S} a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma}] - \frac{1}{2}[\hat{S}[\hat{S} a_{\mathbf{m}\sigma}^{+} a_{\mathbf{m}'\sigma}]]. \tag{28}$$

Теперь (25) можно вычислять с преобразованным оператором (28), усреднением по Φ_0 (и последующим усреднением по всем 2^N спиновым конфигурациям). Получим

$$\langle \Delta\hat{n}(\mathbf{r}) \Delta\hat{n}(\mathbf{r}') \rangle = \sum_{\mathbf{m}} \varphi_{\mathbf{m}}^2(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{m}}^2(\mathbf{r}') \sum_{\mathbf{g}} \frac{J^2(\mathbf{g})}{U^2} - \\ - \sum_{\mathbf{m}\mathbf{m}'} \varphi_{\mathbf{m}}^2(\mathbf{r}) \varphi_{\mathbf{m}'}^2(\mathbf{r}') \sum_{\mathbf{g}} \frac{J^2(\mathbf{g})}{U^2} \delta_{\mathbf{m}-\mathbf{m}', \mathbf{g}} + \dots \tag{29}$$

(точками обозначены члены, происходящие от $n(\mathbf{r})\, n(\mathbf{r}')$, они четны по $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ и вклада в $\langle d^2 \rangle$ не дают). Для $\langle d^2 \rangle$ имеем, учитывая, что в отсутствие сегнетоэлектрического порядка $\varphi_{\mathbf{m}=0}^2(-\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{m}=0}^2(\mathbf{r})$,

$$\langle \hat{d}^2 \rangle = e^2 \int xx' \langle \Delta\hat{n}(\mathbf{r}) \Delta\hat{n}(\mathbf{r}') \rangle d\mathbf{r} d\mathbf{r}' = \sum_{\mathbf{m}} m_x^2 \sum_{\mathbf{g}} \frac{J^2}{U^2} - \sum_{\mathbf{m}\mathbf{g}} m_x (\mathbf{m}+\mathbf{g})_x \frac{J^2}{U^2} = \\ = -\sum_{\mathbf{m}\mathbf{g}} m_x g_x \frac{J^2}{U^2}. \tag{30}$$

Правая часть выражения равна нулю, так как $\sum_{\mathbf{m}} \mathbf{m} = 0$ (условие нейтральности). Аналогично можно получить $\langle \Delta N^2 \rangle = 0$. Учет температуры привел бы к появлению в матрице плотности ρ_0 дырочно-двоечных состояний, которые вошли бы со щелевым множителем $e^{-E/kT}$, $E \sim U$. Таким образом, состояние Φ (с точностью до $(J/U)^2$) является в нашем понимании диэлектрическим. Это становится более наглядным, если рассмотреть структуру

[7] Строго говоря, надо использовать матрицу плотности ρ_0, соответствующую Φ_0, но учитывающую равновероятность спиновых конфигураций.

состояния Φ (26). Состояние Φ_0 гомеополярно, состояние $\hat{S}\Phi_0$ содержит одну двойку и одну дырку, а $\hat{S}^2\Phi_0$ — не более двух двоек и дырок. Однако физически очевидно, что в основном состоянии проводника число полярных возбуждений (двоек и дырок) должно быть пропорционально N. Наличие любого конечного, не зависящего от N числа полярных возбуждений (как в Φ) не делает состояния проводящим. Поэтому в любом порядке теории возмущения типа (26) состояние останется диэлектрическим.[8]

Другими словами, диэлектрическое состояние может иметь примесь полярных состояний, что выражается в отличии $\langle \hat{n}_{m\uparrow}\hat{n}_{m\downarrow}\rangle$ от нуля (в нашем приближении $\langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow\rangle = z/2\cdot(J/U)^2$). Отметим, что попытки связать переход в проводящее состояние с нарушением гомеополярности делались неоднократно (см., например, [12]). Но из сказанного выше видно, что примесь полярных состояний вовсе не означает наличия зарядов, способных двигаться инфинитно.

6. Обсуждение результатов

Предложенный критерий отличия диэлектрика от проводника определяется поведением среднеквадратичной флуктуации дипольного момента — чисто статической величины. В случае диэлектрика дипольный момент ведет себя как аддитивная величина, поскольку ее средний квадрат пропорционален V [18]. Такое поведение d можно рассматривать как проявление локализации электронов относительно узлов решетки (ионов). Аномальному же поведению $\langle d^2\rangle \sim V^{1+\gamma}$, $\gamma > 0$ соответствует делокализация электронов. Иными словами, то или иное поведение $(\langle d^2\rangle/V)_{V\to\infty}$ придает точный смысл интуитивному представлению о локализованности или делокализованности электронных состояний (финитному или инфинитному движению электронов). Заметим, что делокализация имеет существенно различный характер для нормального проводника и для сверхпроводника. В первом аномалия $\langle d^2\rangle_{T=0}$ обусловлена медленным убыванием функции корреляции на больших расстояниях, во втором — наличием флуктуаций плотности при $T=0$. (Подробно это будет рассмотрено в другой работе).

Флуктуационно-диссипационная теорема позволяет однозначно связать локализацию или делокализацию с другой статической величиной — реакцией $\varkappa_0$ на однородное статическое электрическое поле (ОЛО), принципиально различной для проводника и диэлектрика.[9] При этом кинетическая величина $\varkappa''(\omega)$ в окончательном результате не фигурирует. Подчеркнем, что проводящее состояние характеризуется «от противного»: конечные в случае диэлектрика величины $\varkappa_0$ и $\langle d^2\rangle/V$, $V\to\infty$ для проводника равны ∞, т. е. не имеют смысла.

Переход диэлектрик—нормальный проводник сводится к изменению асимптотики $K(\mathbf{r}\mathbf{r}')$ при $(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\to\infty$ $(T=0)$. Он не сопровождается «сильными» флуктуациями и поэтому не может быть описан каким-либо параметром порядка (даже в условном смысле, как при переходе газ—жидкость). Имеется, однако, некоторая параллель с переходами (при $T\neq 0$) в плоских системах [19].

Выше мы распространили наш подход на идеальные (неэргодичные) системы, полагая, что если «кинетические» члены гамильтониана (обеспечивающие эргодичность) малы, то пренебрежение ими не изменит классификации системы как диэлектрика или проводника. В самом деле, в случае проводника отбрасывание этих членов только усугубит сингулярности

---

[8] При вычислениях в (30) мы пренебрегли поверхностным вкладом, т. е. считали, что у всех узлов, по которым выполнялось суммирование, имеется одинаковое число $z=\sum_g$ ближайших соседей. В противоположность этому флуктуации в Ферми-газе $\sim V^{1/3}$ объемные (из смысла ФДТ, где фигурирует предел $V\to\infty$, следует, что существенны именно такие флуктуации).

[9] Попытка использовать соотношения Каллена—Вельтона для проводимости $\sigma(\omega)$ не привела бы к желаемому результату (классификации), так как коррелятор тока $\langle J^2\rangle$ в отличие от $\langle d^2\rangle$ всегда «нормален».

(так, σ_0 станет равной ∞), а в случае диэлектрика не приведет к эффекту поля. Однако их учет важен в окрестности перехода диэлектрик—проводник, а также в неупорядоченных системах пониженной размерности: в них возможно появление экспоненциального убывания $K(\mathbf{rr}')$ при сколь угодно малом беспорядке.

Итак, задача о классификации «диэлектрик—проводник» сводится к изучению статических характеристик—среднеквадратичной флуктуации числа электронов $\langle \Delta N^2 \rangle$ и корреляционной функции $K(\mathbf{rr}')$ в окрестности $T=0$. Это позволяет также четко поставить задачу о переходе диэлектрик—нормальный проводник.

Автор выражает благодарность В. Д. Кагану, С. А. Ктиторову, Ю. А. Фирсову за полезное обсуждение.

Список литературы

[1] De Boer J. H., Verwey E. J. W. // Proc. Phys. Soc. 1937. V. 49. N 1. P. 59—64.
[2] Adler D. // Rev. Mod. Phys. 1968. V. 40. N 4. P. 714—736.
[3] Метфессель З., Маттис Д. Магнитные полупроводники. М.: Мир. 1972.
[4] Гуденаф Д. Магнетизм и химическая связь. М.: Металлургия, 1968.
[5] Мотт Н. Ф. Переходы металл—изолятор. М.: Наука. 1979.
[6] Mott N. F. // Proc. Roy. Soc. 1949. V. A62. P. 416—420.
[7] Mott N. F. // Rev. Mod. Phys. 1968. V. 40. N 4. P. 677—680.
[8] Hubbard J. C. // Proc. Roy. Soc. 1963. V. A276. P. 238—257 (I); 1964. V. A277. P. 237—259 (II); 1964. V. A281. P. 401—419 (III).
[9] Herring C. // Magnetizm. IV. N. Y.—L., 1966.
[10] Brinkman W. F., Rice T. M. // Phys. Rev. B. 1970. V. 2. N 10. P. 4302—4304.
[11] Хомский Д. И. // ФММ. 1970. Т. 29. № 1. С. 31—79.
[12] Bernasconi J. // Phys. Kond. Mat. 1972. V. 14. N 2. P. 225—251.
[13] Зайцев Р. О. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. № 6. С. 2360—2369.
[14] Зайцев Р. О., Кузьмин Е. В., Овчинников С. П. // УФН. 1986. Т. 148. № 4. С. 603—636.
[15] Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И. Проблемы современной физики. Л.: Наука, 1980. С. 233—246.
[16] Kohn W. // Phys. Rev. 1964. V. 133A. N 1. P. 171—176.
[17] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М.: ГИТТЛ, 1957. 532 с.
[18] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 567 с.
[19] Березинский В. Л. // ЖЭТФ. 1970. Т. 59. № 3. С. 907—927; 1971. Т. 61. № 4. С. 1144—1164.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе
Ленинград

Поступило в Редакцию
31 января 1991 г.