

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ИНТЕГРАЛОВ ПЕРЕНОСА НА ПЕРЕХОД АНДЕРСОНА В СТРУКТУРНО-НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

Л. П. Гинзбург

С помощью численного эксперимента показано, что приближения, основанные на неучете бесконечного множества малых интегралов переноса, могут приводить к существенным ошибкам в оценке условия перехода Андерсона.

1. Гамильтониан структурно-неупорядоченной системы (СНС) может быть записан в виде (см., например, [1])

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_n W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|), \quad (1)$$

где $W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)$ — случайный одноцентровый потенциал, входящий в уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)\right) \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|) = E \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|). \quad (2)$$

В отличие от систем с диагональным беспорядком (ДБ), где координаты центров \mathbf{R}_n совпадают с узлами правильной решетки, а величины $W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)$ и E оказываются случайными функциями номера узла n ($W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|) \rightarrow W_n(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)$, $E \rightarrow E_n$), в случае СНС эти величины от n не зависят и неупорядоченность связана со случайным распределением координат \mathbf{R}_n в пространстве.

Несложно показать, что в представлении чисел заполнения гамильтониан (1) переписывается в виде

$$H = \sum_n a_n^\dagger a_n \left(E + \sum_{l \neq n} U(R_{ln}) \right) + \sum_{m \neq n} \sum_n a_m^\dagger a_n (E \langle \varphi_m | \varphi_n \rangle + V(R_{mn}) + \sum_{l \neq m, n} \langle \varphi_m | W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_l|) | \varphi_n \rangle). \quad (3)$$

В выражении (3) a_n^\dagger , a_n — операторы рождения и уничтожения электрона в точке \mathbf{R}_n и $\varphi_n \equiv \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|)$. Кроме того, $\mathbf{R}_{mn} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n$,

$$U(R_{mn}) = \langle \varphi_n | W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_m|) | \varphi_n \rangle, \quad (4)$$

$$V(R_{mn}) = \langle \varphi_m | W(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_m|) | \varphi_n \rangle. \quad (5)$$

Известно, что в условиях ДБ вариации величины E_n ответственны за переход Андерсона [1]. В случае СНС можно вообще положить $E=0$ и свойства

системы должны определяться остальной частью (3). Обычно здесь используется приближение сильной связи, когда не учитывается последняя (трехцентровая) сумма (3). В этом случае основным хаотизирующим фактором оказываются интегралы переноса $V(R_{mn})$, которым нередко приписывается модельное выражение

$$V(R_{mn}) = -V_0 \exp\left(-\frac{R_{mn}}{a}\right). \quad (6)$$

В рамках изложенного подхода можно считать доказанным, что в СНС вариации $V(R_{mn})$ также приводят к переходу Андерсона [2-6]. Критерий перехода имеет вид

$$N^{1/2}a \geq C, \quad (7)$$

где N — концентрация центров, $C = \text{const}$, знак $<$ соответствует локализации всех состояний, а знак $>$ появлению состояний, которые делокализованы. Можно, однако, отметить, что наблюдается большой разброс в значениях величины C . Для нее получено: 0.08 [2], 0.16 [3], 0.20 [4], 0.30 [5], 0.37 [6]. В связи с отмеченным разбросом обратим внимание на следующее. В работах [2-4] (и многих других) критерий локализации ищется на пути оценки сходимости ренормированного ряда для собственно энергетической части функции Грина. Но в термодинамическом пределе оценить асимптотику этого ряда трудно. Поэтому в работах такого типа обязательно используются приближения, которые так или иначе связаны с отбрасыванием бесконечного подмножества интегралов переноса. Автору не приходилось сталкиваться с анализом справедливости такой процедуры, с выяснением последствий, к которым она может привести. Единственный аргумент, как правило, основан на том, что при больших R_{mn} величина $V(R_{mn})$ становится малой. Однако априори остается неясным, в какой степени в термодинамическом пределе эта малость не компенсируется ростом количества интегралов. То же самое можно сказать и в отношении работ [5, 6]. Здесь свойства СНС изучались посредством расчета на ЭВМ численных моделей. В указанных работах накладывалось условие: $V(R_{mn}) = 0$, если $R_{mn} > R_0$. При этом $R_0 = 0.15 \Omega^{2/3}$ [5], $0.50 \Omega^{2/3}$ [6], где Ω — объем системы. Так как в перечисленных работах использовались разные приближения, то разброс значений C указывает на большую чувствительность СНС к процедуре оценки вклада интегралов переноса.

В настоящей работе предпринята попытка вскрыть механизм влияния этого вклада на эффект локализации в СНС, а также указать на то, что отбрасывание бесконечного множества интегралов переноса — операция не безобидная.

2. Интегралы переноса определяют прежде всего энергетический спектр системы. Но последний существенно связан с вопросом локализации состояний. Например, при низких температурах вероятность f того, что электрон не покидает область вблизи точки $\mathbf{r}=0$, может быть записана в виде [7]

$$f = \frac{1}{(2\pi)^2} \left\langle \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} |\psi_{\lambda}(0)|^2 |\psi_{\lambda'}(0)|^2 \frac{\theta(E_{\lambda} - E_F) \theta(E_{\lambda'} - E_F)}{E_{\lambda'} - E_{\lambda} + 2i\varepsilon} \right\rangle, \quad (8)$$

где $\psi_{\lambda}(0)$ — волновая функция, соответствующая присутствию электрона в λ -состоянии, с энергией E_{λ} . Из (8) следует, что в условиях непрерывного спектра $f=0$, а в условиях дискретного $f \neq 0$ [7]. В то же время отбрасывание бесконечного множества интегралов $V(R_{mn})$ может в принципе повлиять на характер спектра E_{λ} .

Возможно, более непосредственно подобный эффект можно проследить на результатах работы [8]. Воспользуемся преобразованиями

$$a_n^+ = (N\Omega)^{-1/2} \sum_{\mathbf{K}} C_{\mathbf{K}}^+ e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_n},$$

$$a_n = (N\Omega)^{-1/2} \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_n}. \quad (9)$$

Если в (3) отбросить последний член, то с помощью (9) оператор H можно представить в виде

$$H = \sum_{\mathbf{K}} \sum_{\mathbf{K}'} C_{\mathbf{K}}^+ C_{\mathbf{K}'} \left\{ (N\Omega)^{-1} \left[\sum_n e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{K}')\mathbf{R}_n} \left(\sum_{i \neq n} U(R_{i_n}) + \sum_{m \neq n} e^{-i\mathbf{K}'\mathbf{R}_{mn}} V(R_{mn}) \right) \right] \right\}. \quad (10)$$

Так как вектор \mathbf{K} непрерывен, то из (10) видно, что эффект локализации может возникнуть только за счет недиагональных членов (при $\mathbf{K} \neq \mathbf{K}'$). Более того, в [8] показано, что вклад этих членов в величину $E_\lambda = \langle \Psi(\lambda) | H | \Psi(\lambda) \rangle$, где $\Psi(\lambda)$ — собственный вектор λ -состояния, может быть представлен в виде

$$\gamma(\lambda) L_\lambda \sum_{\mathbf{K}} E_{\mathbf{K}} \langle \Psi(\lambda) | C_{\mathbf{K}}^+ C_{\mathbf{K}} | \Psi(\lambda) \rangle, \quad (11)$$

где

$$E_{\mathbf{K}} = N \int d\mathbf{R} [U(R) + e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}} V(R)], \quad (12)$$

и в общем случае $0 < \gamma(\lambda) < \infty$. Сумма в (11) совпадает с вкладом диагональных членов, а величина $|L_\lambda|^2$ представляет собой не что иное, как обратный индекс распространения, который равен 1 в случае локализованных состояний и стремится к нулю в случае делокализованных [1]. Таким образом, оценка относительного вклада недиагональных членов в (10) позволяет однозначно судить о локализации состояний. В то же время из (10) видно, что вычеркивание того или иного множества интегралов $V(R_{mn})$ может заметно отразиться на оценке указанного вклада.

3. Для того чтобы убедиться в сказанном выше, был предпринят численный эксперимент. Для примера он был применен к распространенному случаю, когда отбрасываются интегралы переноса, не относящиеся к ближайшим соседям.

Рассмотрим выражение

$$S(K_1 - K_2) = \sum_{n=1}^{N_0} \cos[(K_1 - K_2) X_n] \left(\sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{N_0} \cos[K_2(X_m - X_n)] V(X_m - X_n) \right). \quad (13)$$

Если задать массив из N_0 случайных, нарастающих по величине чисел X_n , то выражение (13) окажется аналогом второго члена в квадратной скобке (10). Этот член может быть оценен с помощью ЭВМ. Были рассмотрены два случая. Первый, в котором

$$V(X_m - X_n) = \exp(-\alpha |X_m - X_n|). \quad (14)$$

Этот случай соответствует учету всех слагаемых в (10). Во втором случае

$$V(X_m - X_n) = \begin{cases} V_1, & \text{если } |m - n| = 1, \\ 0, & \text{если } |m - n| > 1. \end{cases} \quad (15)$$

Этот случай соответствует учету только ближайших соседей. При этом легко видеть, что в условиях $V_1 > 1$ величина каждого, дающего вклад слагаемого окажется завышенной по сравнению с аналогичным членом (14). Согласно предыдущему, нас специально интересует термодинамический предел. Поэтому были изучены три массива: $N_0 = 70, 200, 300$. При этом средняя разность чисел

сохранялась практически постоянной: 0.925, 0.999, 0.999, а величинам α и V_1 во всех случаях придавались значения 0.3 и 100.¹

Типичная гистограмма, соответствующая случаю $N_0=70$, приведена на рис. 1. Подобный вид имели гистограммы и в случаях $N_0=200, 300$. Из этого рисунка видно, что в случае (14) имеет место резкое возрастание суммы S (K_1-K_2) при $K_1=K_2$. В условиях (15) такого возрастания не наблюдается. На рис. 2 представлены зависимости отношения $|S(0)/S_m|$, где S_m — максимальное значение $|S(K_1-K_2)|$ при $K_1 \neq K_2$. Из этого рисунка видно, что поведение отношения в условиях (14) и (15) существенно различно. Если в первом случае видна тенденция к неограниченному возрастанию $|S(0)/S_m|$ с ростом N_0 , то во втором — тенденция к убыванию.

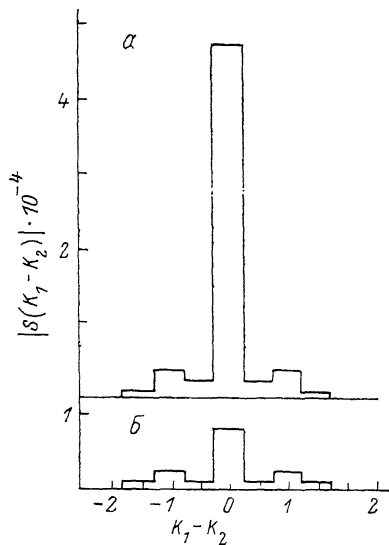


Рис. 1. Зависимость модуля суммы (13) от разности K_1-K_2 для случаев (14) (а) и (15) (б).

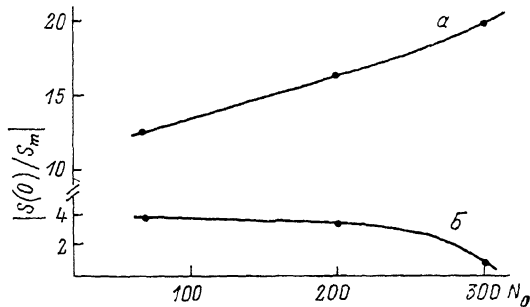


Рис. 2. Зависимость модуля отношения $S(0)/S_m$ от размера массива N_0 для случаев (14) (а) и (15) (б).

Результат численного эксперимента наглядно показывает, что при учете только ближайших соседей относительный вклад недиагональных членов (13) (а следовательно, (10)) резко возрастает. При этом в термодинамическом пределе этот эффект усиливается. Согласно предыдущему, это означает, что в данном приближении любой критерий локализации не может претендовать на количественную достоверность. На наш взгляд, отсюда следует вывод, что в условиях СНС к процедурам отбрасывания бесконечного множества пусть даже малых интегралов переноса следует вообще подходить с большой осторожностью. По всей видимости, неучет этого обстоятельства и приводит к большим вариациям величины C в (7).

Список литературы

- [1] Эфрос А. Л. // УФН. 1978. Т. 126. № 1. С. 41—65.
- [2] Елютин П. В. // ФТТ. 1979. Т. 21. № 9. С. 2765—2771.
- [3] Fertis A. C., Andriotis A. N., Economou E. N. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 10. P. 5806—5811.
- [4] Logan D. E., Wolynes P. G. // J. Chem. Phys. 1986. V. 85. N 2. P. 937—948.
- [5] Elyutin P. V., Hickey B., Morgan G. J., Weir G. F. // Phys. Stat. Sol. (b). 1984. V. 124. P. 279—286.
- [6] Ching W. Y., Huber D. L. // Phys. Rev. B. 1982. V. 25. N 2. P. 1096—1100.
- [7] Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р., Миронов А. Г., Эндерлайн Р., Эссер Б. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М., 1981. 383 с.
- [8] Гинзбург Л. П. // ФТП. 1989. Т. 23. № 5. С. 813—819.

Московский институт связи

Поступило в Редакцию
3 октября 1989 г.
В окончательной редакции
19 июля 1991 г.

¹ Случай $N_0=70$ изучался на ЕС-10-10, а случаи $N_0=200, 300$ — на ЕС-10-22.