

О ЛОКАЛИЗАЦИИ ДЕФЕКТА В ОДНОМЕРНОМ ЭЛЕКТРОННОМ ГАЗЕ

Н.В. Прокофьев

Российский Научный центр "Курчатовский институт"
123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 февраля 1995 г.

Рассматривается задача о локализации примеси за счет эффектов обратного рассеяния на примесном потенциале одномерного (1D) взаимодействующего электронного газа. Вычислен показатель экспоненты для интеграла ортогональности, отвечающего смещению рассеивающего потенциала на произвольное расстояние, и показано, что "катастрофа ортогональности" за счет рассеяния назад может быть сколь угодно велика. Полученные результаты существенно зависят от взаимодействия в системе и принципиально отличаются как от случая невзаимодействующих электронов, так и от известных результатов в 2D-, 3D-системах.

1. Интерес к одномерным системам (1D) определяется реально осуществимой технологически возможностью создать такие системы в полупроводниковых нано-структурах, изучением свойств органических проводников, а также непосредственным приложением к описанию низкотемпературной динамики систем в режиме квантового эффекта Холла. Система взаимодействующих электронов в 1D обладает целым рядом свойств, которые не имеют аналогов в более высокой размерности пространства. В частности, как было показано в работах [1], любой, сколь угодно слабый, примесный потенциал в системе электронов с отталкиванием ведет асимптотически к полному отражению от потенциала за счет усиления процессов обратного рассеяния. С точки зрения проводимости это означает диэлектризацию системы при $T = 0$. Рассеяние электрона назад (с изменением импульса на $2k_F$) меняет также степенную особенность в интенсивности испускания/поглощения фотона вблизи порога. В случае 2D, 3D интенсивность процесса фотопоглощения ведет себя как $I(\omega) \sim \omega^\alpha$, с показателем α , который явно зависит от свойств рассеивающего потенциала дырки во внутренней оболочке атома, возникшей в результате перехода электрона в зону проводимости [2]. В 1D-системе рассеяние назад приводит к универсальному значению индекса α , который остается конечным, даже когда рассеивающий потенциал и электронные корреляции стремятся к нулю [3].

Полученные ранее результаты были выведены в предположении, что рассеивающий потенциал остается статическим. Поскольку отклик сингулярен на больших временах, то справедливость этого предположения требует локализации рассеивающего центра в основном состоянии, что, как показано ниже, имеет место только при определенных условиях. В общем случае речь идет о подвижности дефекта любой природы в 1D, и о вычислении отклика системы на динамический потенциал, если дефект делокализуется.

Мы предполагаем, что рассеивающая частица, помимо взаимодействия с электронами проводимости, находится также в периодическом потенциале решетки и ее кинетическая энергия описывается моделью сильной связи

$$H_h = \Delta \sum_n d_{n+1}^\dagger d_n + \text{h.c.} , \quad (1)$$

где оператор d_n^\dagger рождает частицу в узле n , а матричный элемент перескока Δ предполагается малым по сравнению с энергией Ферми E_F (которая также играет роль характерного высокочастотного обрезания в задаче).

Система электронов описывается в рамках представления о жидкости Латтинжера (ЖЛ) [4]. Во вторичном квантовании гамильтониан безспиновой ЖЛ имеет вид [4]

$$H_0 = \sum_q \omega_q b_q^\dagger b_q + \frac{\pi}{2L} (v_N N^2 + v_J J^2), \quad (2)$$

где $\omega_q \approx c|q|$ для малых значений волнового вектора $q = 2\pi k/L$ (k целое), $L \rightarrow \infty$ – длина цепочки, N и J целые числа, равные соответственно полному числу частиц (отсчитанному относительно основного состояния) и разнице в количестве электронов, движущихся вправо и влево. Скорости, связанные с зарядовыми, $Q = eN$, и токовыми, $j = ev_J/L$, возбуждениями, зависят от скорости звука c и константы электрон-электронного взаимодействия g , так что $v_N = c/g$, $v_J = cg$. Свободный газ соответствует $g = 1$, случай $g < 1$ отвечает отталкиванию между частицами.

Рассеянию вперед отвечает локальное взаимодействие с флуктуациями плотности электронов, $H_F = V_F \Psi^\dagger(x) \Psi(x)$, или

$$H_F = \sqrt{g} V_F \sum_q \sqrt{\frac{|q|}{2\pi L}} (b_q + b_{-q}^\dagger) e^{-iqx}, \quad (3)$$

Процесс обратного рассеяния электрона $H_B = V_B \Psi_l^\dagger(x) \Psi_r(x) + \text{h.c.}$ меняет на 2 число J и одновременно приводит к возбуждению флуктуаций плотности. В бозонном представлении гамильтониан H_B можно переписать в виде [5]

$$H_B = \sum_{J=-\infty}^{+\infty} \left(V_B e^{2ik_F x} a_{J+2}^\dagger a_J e^{\sqrt{g}S} + \text{h.c.} \right), \quad (4)$$

$$S = i \sum_{q \neq 0} \text{sgn}(q) \sqrt{\frac{2\pi}{|q|L}} (b_q + b_{-q}^\dagger) e^{-iqx}. \quad (5)$$

Здесь S – стандартный оператор сдвига нормальных осцилляторов. Этот гамильтониан тождественно совпадает с гамильтонианом частицы на решетке, взаимодействующей с омическим бозонным термостатом [6], который активно изучался в течение последних десяти лет (см., например, [7]).

Для ответа на вопрос о локализации рассеивающей частицы в основном состоянии необходимо найти показатель экспоненты для интеграла ортогональности между состояниями системы, которые отвечают рассеянию на потенциале в точках $x = 0$ и $x = a$, соответственно:

$$\langle V(x=0) | V(x=a) \rangle \equiv e^{-\phi} \sim \exp\{-K \ln(E_F/E_{min})\}. \quad (6)$$

При K больше критического значения $K_c = 1$ частица локализуется в решетке при $T = 0$, несмотря на трансляционную симметрию задачи [8, 7] (по крайней мере в квадратичном по Δ приближении, см. также ниже). Вывод о локализации легко прослеживается из следующего простого рассуждения.

Взаимодействие частицы с термостатом ведет к поляронному сужению эффективной амплитуды перескока по закону

$$\bar{\Delta} = \Delta e^{-\phi} = \Delta [\bar{\Delta}/E_F]^K. \quad (7)$$

Мы ввели самосогласованное обрезание при низких энергиях, так как на временах $t\bar{\Delta} > 1$ нельзя больше рассматривать рассеяние на потенциале как статическое. Для $K < 1$ решение самосогласованного уравнения

$$\bar{\Delta} = \Delta [\Delta/E_F]^{K/(1-K)} \quad (8)$$

определяет масштаб энергии, ниже которого частица делокализуется. При $K \geq 1$ единственное решение (8) дает $\bar{\Delta} = 0$.

2. Рассмотрим сначала рассеяние вперед, при котором потенциал в точке $x = a$ содержит дополнительный фазовый множитель $\exp\{-iqa\}$ по сравнению со случаем $x = 0$. Используя стандартное преобразование, диагонализующее $H_0 + H_F$, находим

$$e^{-\phi_F} = \exp \left\{ -\frac{g\delta_F^2}{2\pi^2} \int_0^{q_{max}} \frac{dq}{q} (1 - \cos qa) \right\}. \quad (9)$$

Интеграл по dq хорошо определен при $q \rightarrow 0$, и инфракрасная особенность обрезается на $q \sim 1/a$ (здесь $\delta_F = \pi V_F/c$). Это означает, что рассеяние вперед ведет лишь к конечной перенормировке амплитуды перескока за счет процессов на больших энергиях до некоторого значения $\bar{\Delta} = \Delta e^{-\phi_F}$. Таким образом, при низких температурах частица делокализуется. Казалось бы, такая делокализация ведет к размытию особенности в спектре фотопоглощения. Однако в 1D длинноволновые флуктуации плотности рассеиваются вперед на движущейся частице так же, как и на неподвижном центре. В самом деле, динамикой частицы можно пренебречь, если размер области делокализации много меньше обратной передачи импульса в типичном акте рассеяния. К моменту времени t размер делокализации частицы в лучшем случае не превышает $l < v_g t$, где v_g - максимальная групповая скорость (для квадратичного закона дисперсии, $\epsilon(p) = p^2/2M_*$, когерентная делокализация волнового пакета на самом деле идет по гораздо более медленному закону $l^2 \sim t/M_*$). Основной вклад в особенность $I(t)$ связан с волновыми векторами $cqt \sim 1$. В результате на всех временах выполняется необходимое условие $ql \ll 1$, и степенная особенность за счет процессов рассеяния вперед не зависит от движения частицы [9].

Этот результат находится в резком противоречии с тем, что следует из делокализации центра в 2D и 3D или при учете обратного рассеяния в 1D. Во всех перечисленных случаях инфракрасная особенность (ИО) связана с *большими* передачами импульса при *малых* энергиях. Для короткодействующего потенциала ИО определяется интегралами вида $\int_{FS} dq \int dE/E$. Если мы примем когерентную делокализацию частицы на больших временах, то при $t \rightarrow \infty$ в этом выражении останется лишь вклад малых передач импульса, $|q|^2 \sim M_*/t$. Их суммарный вклад в интеграл ортогональности будет падать с ростом t по закону

$$K \sim \begin{cases} 1/T_0 t, & 3D \\ 1/\sqrt{T_0 t}, & 2D \\ 0, & 1D \text{ (рассеяние назад)} \end{cases}, \quad (10)$$

где $T_0 = M_* k_F^2$, и уравнение (10) справедливо при $T_0 t \gg 1$. Данный вывод полностью совпадает с аргументами Нозьера [10].

Существует и чисто кинематическая причина, запрещающая рассеяние на большой угол при низких энергиях. Заметим, что T_0 совпадает с типичной энергией отдачи при квазиупругом рассеянии электрона. Допустим, что энергия частицы много меньше T_0 и налетающий электрон имеет энергию $\epsilon - \epsilon_F \ll T_0$. В этих условиях рассеяние с передачей $q \sim k_F$ запрещено принципом Паули, так как максимально возможная передача энергии оказывается много меньше T_0 . Выживает лишь малоугловое рассеяние электронов вблизи поверхности Ферми. Легко оценить, что площадь ферми-поверхности, которую покрывают разрешенные конечные состояния электрона, падает пропорционально квадрату импульса частицы, то есть $K \sim p^2/k_F^2$, что возвращает нас обратно к (10). Таким образом, в размерности $2D$, $3D$ и в $1D$ для случая рассеяния назад ИО размывается, если рассеивающий центр делокализуется на масштабе $l > 1/k_F$.

3. Рассмотрим теперь условия, при которых показатель K в (6) больше критического значения 1. В случае $2D$ и $3D$ это условие может быть выполнено только для достаточно дальнедействующего потенциала, имеющего несколько орбитальных каналов рассеяния, дающих вклад в интеграл ортогональности. Точное выражение для K имеет вид [11]

$$K = \frac{1}{8\pi^2} \text{Tr} \{ \ln^2 [S^{-1}(a)S(0)] \} = \frac{1}{2\pi^2} \sum_j (\delta_j^{eff})^2, \quad (11)$$

где $S(a)$ – S -матрица рассеяния на потенциале $V(a)$, а эффективные фазы рассеяния определяют собственные значения матрицы $[S^{-1}(a)S(0)]_{jj} = e^{-2i\delta_j^{eff}}$. В общем случае $S(a)$ и $S(0)$ не коммутируют. Для произвольного потенциала имеет место теорема [12], ограничивающая возможные значения фаз $|\delta_j^{eff}| \leq \pi/2$. Это означает, что требуется более восьми отличных от нуля собственных значений $\{\delta_j^{eff}\}$ (более четырех при учете спинового вырождения) для достижения критического значения $K_c = 1$. На первый взгляд, локализация частицы благодаря рассеянию назад принципиально невозможна в $1D$, так как единственный канал рассеяния в исходном потенциале приводит в лучшем случае лишь к двум отличным от нуля эффективным фазам рассеяния, так что их суммарный вклад не превышает $1/4$. Данное утверждение действительно справедливо для свободного электронного газа, однако поведение взаимодействующей системы полностью противоречит интуиции, развитой для более высокой размерности. При $g < 1$ вклад флуктуаций спиновой и зарядовой плотности в интеграл ортогональности равен нулю! (В $2D$, $3D$ интеграл ортогональности определяется исключительно флуктуациями плотности). Действительно, для произвольного короткодействующего потенциала не зависимо от положения рассеивающего центра мы имеем одно и то же состояние электронной подсистемы, отвечающее полному отражению от потенциала (электронные фазы в четном и нечетном каналах равны соответственно $\pi/4$ и $-\pi/4$ [3]).

Отличный от нуля вклад в (6) возникает не от континуума возбуждений электрон-дырочных пар, а от единственной степени свободы, связанной с квантовым числом J , при этом катастрофа ортогональности оказывается сильнее, чем для свободного газа. В представлении (4) смещение потенциа-

ла рассеяния в соседнее положение $x = a$ меняет фазу амплитуды обратного рассеяния $V_B \rightarrow V_B e^{2ik_F a}$. С точки зрения переменной J дополнительная фаза в амплитуде перескока $J \rightarrow J + 2$ эквивалентна сдвигу центра зоны Бриллюэна в импульсном представлении в точку $P_J = k_F a$. Очевидное унитарное преобразование

$$\tilde{H} = e^{ik_F a J} H e^{-ik_F a J} \quad (12)$$

связывает состояния системы до и после сдвига потенциала. Выражение для интеграла ортогональности теперь можно представить в виде

$$e^{-\phi_B(t)} = \langle e^{ik_F a J(0)} e^{-ik_F a J(t)} \rangle = \exp \left(-\frac{(k_F a)^2}{2} \langle J(0)J(t) \rangle \right). \quad (13)$$

Воспользуемся теперь известными результатами для динамики частицы, взаимодействующей с омическим термостатом. При $g < 1$ основное состояние переменной J делокализовано с $\langle J^2 \rangle \gg 1$. На самом деле сильная неопределенность токового состояния одномерной системы (оператор тока равен $v_J J/L$ [4]) тождественна утверждению о полном отражении возбуждений от потенциала [5]. В континуальном пределе больших J коррелятор в уравнении (13) может быть выражен через подвижность согласно $\langle J(0)J(t) \rangle \sim 2/(\pi^2 g) \ln t$, [8]. В результате находим

$$K = \frac{1}{g} \left(\frac{k_F a}{\pi} \right)^2 \quad (|k_F a| \leq \pi/2). \quad (14)$$

Для случая $2k_F a = \pi$ (изменение знака потенциала) этот результат был получен в [13]. В силу дискретности J выражение (14) следует периодически продолжить для $|k_F a| > \pi/2$. Неожиданным образом ортогональность состояний системы при сдвиге потенциала определяется перестройкой единственной моды среды, причем в случае $g \rightarrow 0$ показатель экспоненты может быть сколь угодно велик.

Таким образом при $g < (k_F a/\pi)^2$ динамика рассеивающего центра заморожена при $T = 0$, инфракрасная сингулярность в процессах рассеяния назад сохраняется (в частности цепочка диэлектризуется при $T = 0$). В этом месте следует отметить, что приведенные выше рассуждения были основаны на рассмотрении эффективной амплитуды перескока между ближайшими положениями $n \rightarrow n+1$. Если соответствующая экспонента $K_{n,n+1} \equiv K_1$ больше единицы, то амплитудой перескока в соседний узел можно пренебречь в пределе низких температур. Однако это еще не означает, что переходами через один узел (в общем случае через несколько узлов) $n \rightarrow n+m$ с $m \geq 2$, которые затравочно были пренебрежимо малы $\Delta_m \sim \Delta^m/W^{m-1} \ll \Delta$, также можно пренебречь. Соответствующий показатель в скэйлинге $K_m = 1/g (k_F m a/\pi)^2$ ($|k_F m a| \leq \pi/2$) может быть меньше единицы при некотором m , так как мы имеем дело с периодической функцией m , и в общем случае k_F несоизмеримо с $1/a$. Это означает, что в пределе $L \rightarrow \infty$ частица неизбежно делокализуется на масштабе энергий, определяемом наибольшим из самосогласованных решений Δ_m (которое, вероятнее всего, соответствует наименьшему значению m , для которого $K_m < 1$). Вместе с тем, в реальных системах этот масштаб энергий для $m \geq 2$ представляет, скорее всего, чисто академический интерес. Заметим для сравнения, что в стандартной диссипативной модели (как это имеет место для переменной J) [6–8] зависимость $K_m \sim (m a)^2$ предполагается справедливой

для всех ma , так что критерий локализации $K_1 \geq 1$ автоматически означает, что все амплитуды перескока равны нулю в основном состоянии.

4. Рассмотрим теперь совершенно другой случай, когда ИО в процессах обратного рассеяния сохраняется до предельно низких энергий для подвижного центра. Предположим, что константа взаимодействия между электронами удовлетворяет условию $1/4g \gg 1$ при малом значении импульса Ферми $k_{Fa} \ll 1$, так что показатель экспоненты в интеграле ортогональности между ближайшими соседями (13) меньше критического значения (или даже $K_1 \ll 1$). При температуре $T < \bar{\Delta}$, определяемой уравнением (8), частица делокализуется и приобретает эффективную массу порядка $1/\bar{\Delta}a^2$. Предполагая когерентную делокализацию при более низких температурах и применяя те же аргументы в отношении рассеяния электронов на большой угол, что и при выводе (10), мы бы получили размытие ИО на энергиях ниже $T_0 \sim \bar{\Delta}(k_{Fa})^2$. Однако когерентная делокализация на масштабе T_0 невозможна, если параметр g мал. Действительно, при температурах выше T_0 (когда импульс частицы много больше, чем k_F) вычисление вероятности рассеяния Γ в рамках стандартной омической модели, которой в данном случае соответствует квазиупругое рассеяние электронов на частице, дает [14]

$$\Gamma = T_0 \frac{2}{\pi g}. \quad (15)$$

Мы видим, что $T_0 \ll \Gamma < \bar{\Delta}$ для малых g , и в области температур $T < \Gamma$ когерентная динамика частицы принципиально невозможна. Волновой пакет в этих условиях расплывается по логарифмическому закону

$$k_F^2 \langle (R(0) - R(t))^2 \rangle \sim \frac{g}{2} \ln \Gamma t. \quad (16)$$

В отличие от аналогичного результата для переменной J , который был справедлив при всех T , выражение (16) работает лишь пока правая часть (16) меньше единицы. Тем не менее, вплоть до экспоненциально больших времен $t_0 \sim \Gamma^{-1}e^{2/g}$ рассеяние электронов на частице не отличается от рассеяния на статическом центре. Лишь на временах $t > t_0$ масштаб делокализации частицы начинает превышать $1/k_F$, и инфракрасные расходимости сглаживаются.

Таким образом, при $g \ll 1$ сингулярные свойства процесса обратного рассеяния в спектре фотопоглощения/эмиссии и в проводимости проявляются в полной мере, независимо от того, превосходит ли показатель экспоненты в интеграле ортогональности между ближайшими узлами критическое значение 1 или нет.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 95-02-06191a), а также при частичной поддержке Канадского научного фонда NSERC и Института Лауэ-Ланжевена.

-
1. C.L.Kane and M.P.A.Fisher, Phys. Rev. Lett. **68**, 1220 (1992); L.I.Glazman, I.M.Ruzin, and B.I.Shklovskii, Phys. Rev. **B45**, 8454 (1992).
 2. P.Nozières and C.T.deDominicis, Phys. Rev. **178**, 1097 (1969).
 3. N.V.Prokof'ev, Phys. Rev. **B49**, 2148 (1994); вклад в показатель α , связанный с интегралом ортогональности был также вычислен в: A.O.Gogolin, Phys. Rev. Lett. **71**, 2995 (1993).
 4. A.Luther and I.Peschel, Phys. Rev. **B9**, 2911 (1974); F.D.M.Haldane, J. Phys. **C 14**, 2585 (1981).

5. A.O.Gogolin and N.V.Prokof'ev, Phys. Rev. B50, 4921 (1994).
6. A.O.Caldeira and A.J.Leggett, Ann. Phys. 149, 374 (1983).
7. A.J.Leggett, S.Chakravarty, A.T.Dorsey et al., Rev. Mod. Phys. 59, 1 (1987) and refs. therein.
8. A.Schmid, Phys. Rev. Lett. 51, 1506 (1983).
9. T.Ogawa, A.Furusaki, and N.Nagaosa, Phys. Rev. Lett. 68, 3638 (1992).
10. P.Nozieres, Preprint ILL, SP94NO5026 (submitted to J. Physique I) (1994).
11. K.Yamada, A.Sakurai, and M.Takeshige, Prog. Theor. Phys. 70, 73 (1983).
12. Yu.Kagan and N.V.Prokof'ev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 96, 1473 (1989) [Sov. Phys. JETP 69, 836 (1989)].
13. M.Fabrizio and A.O.Gogolin, Preprint ILL, July (1994).
14. N.V.Prokof'ev, Int. J. Mod. Phys. B 7, 3327 (1993).