Письма в ЖЭТФ, том 40, вып. 1, стр. 17 – 20 *10 июля 1984 г.*

МИНИМАЛЬНАЯ МЕТАЛЛИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ В ТЕОРИИ ЛОКАЛИЗАЦИИ

К.Б.Ефетов

В модели на дереве Кэйли рассмотрен андерсоновский переход металл – диэлектрик. Показано, что в проводящей области существует минимальная металлическая проводимость, а в локализованной – максимальная диэлектрическая проницаемость.

В настоящее время существование андерсоновского перехода [1] в диэлектрическое состояние при увеличении беспорядка в металле ни у кого не вызывает сомнений. Однако, вопрос о характере перехода породил множество дискуссий. Согласно Мотту [2] проводимость металла при увеличении беспорядка уменьшается и достигает минимального значения $\sigma_{min} \sim$ $\sim e^2/\hbar a$, где a – межатомная длина. При дальнейшем увеличении беспорядка проводимость скачком обращается в нуль, и система становится диэлектриком. Согласно противоположной точке зрения проводимость не имеет скачков, а плавно обращается в точке перехода в нуль. После появления идей о ренормализационной группе [3] вторая точка зрения стала общепринятой. Обсуждался лишь вопрос о величине индексов в степенном законе убывания. В вопросе о поведении диэлектрической проницаемости при приближении к переходу со стороны диэлектрической области особых расхождений не было. Предполагалось, что она возрастает до бесконечности.

Ниже рассмотрена модель неупорядоченного металла, допускающая точное решение. В этой модели происходит переход металл – диэлектрик. Неожиданным оказывается существование минимальной металлической проводимости в металлической области и максимальной диэлектрической проницаемости в локализованной.

Рассмотрим систему, состоящую из отдельных металлических гранул, находящихся в контакте друг с другом. Электроны могут туннелировать из одной гранулы в другую. В каждой грануле находятся расположенные случайным образом примеси. Предполагается, что длины пробега в гранулах много больше межатомных. Кинетика электронов в случайном потенциале полностью описывается коррелятором плотность-плотность. Вычисление такого коррелятора можно провести методом суперсимметрии [4]. Проводя обычные для этого метода преобразования, приводим коррелятор плотностей $K(r, r')$ к виду

$$K(r, r') = -\,2\pi^2\nu^2 \int Q_{13}^{12}(r) Q_{31}^{21}(r') \exp(-F[Q]) \prod_i dQ_i \,, \tag{1}$$

где
$$F[Q] = \sum_{i,j} J_{ij}\,\mathrm{STr}\,(Q_i - Q_j)^2 + \frac{i(\omega + i\delta)\pi\nu}{4}\sum_j \mathrm{STr}\,(\Lambda Q_j)\,V_j\,.$$

В формуле (1) проводится интегрирование по суперматрице Q. Объем j-ой гранулы равен V_j, плотность состояний ν. Величины J_{ij} пропорциональны квадрату отношения амплитуды туннелирования из одной гранулы в другую к среднему расстоянию между уровнями в гранулах. Матрицы Q и Λ имеют размеры 8 x 8 и равны
$$Q = U \times \begin{pmatrix} \cos\hat\theta & i\sin\hat\theta \\ -i\sin\hat\theta & -\cos\hat\theta \end{pmatrix} \bar U, \quad U = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & v \end{pmatrix}, \quad \Lambda = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Более подробно вид матриц U и $\hat\theta$ описан в [4]. Отметим лишь, что $\bar U U = 1$. Индексы у матриц Q в (1) определяют некоторые элементы этих матриц. Знаком STr обозначен суперслед. Модель, определяемая формулами (1, 2) не может быть решена в общем случае для произвольной решетки гранул в пространстве с произвольной размерностью. В низкой размерности существенны лишь медленные изменения Q в пространстве. В этом пределе конечные разности заменяются пространственными производными, и мы получаем нелинейную σ-модель [4], изучавшуюся в связи с исследованием локализации в низкой размерности. Для изучения андерсоновского перехода рассмотрим простейший случай одинаковых связей и одинаковых гранул, образующих решетку Бете (дерево Кэйли) с числом разветвления m. В теории фазовых переходов модели на дереве Кэйли по существу совпадали с приближением самосогласованного поля. В теории локализации теория среднего поля еще не разработана. Можно надеяться, что , как и в теории фазовых переходов, модель на дереве Кэйли даст хорошее качественное описание перехода. Отметим, что рассматриваемая модель отличается от модели Андерсона на дереве Кэйли, изучавшейся в работе [5]. В [5] было доказано для определенных распределений потенциала существование перехода, но характер критического поведения не был выяснен. В [6] было сделано утверждение о степенно́м убывании проводимости на дереве Кэйли при приближении к точке перехода. При выводе в [6] были сделаны довольно сильные предположения. В частности вычислялось сопротивление всего дерева Кэйли и предполагалось, что удельное сопротивление ведет себя так же, как и полное. Полученные ниже результаты расходятся с утверждением о степенно́м убывании. Вопрос о том,как понимать сопротивление на дереве Кэйли, вообще не возникает, так как вычисляется коррелятор плотностей, вид которого непосредственно определяет коэффициент диффузии.

Структура дерева Кэйли позволяет воспользоваться методом матрицы переноса, аналогичным применяемому для одномерных систем. Наиболее просто вычисляется коррелятор в совпадающих точках. Вид уже такого коррелятора позволяет отличить проводящую область от локализованной и вычислить коэффициент диффузии и диэлектрическую восприимчивость. Предполагая, что взаимодействуют только ближайшие соседи, сводим вычисление коррелятора $K(r, r)$ к вычислению интеграла от решения интегрального уравнения
$$K(r,r) = -2\pi^2\nu^2 \int Q^{12}_{13}\, Q^{21}_{31}\, \psi^{m+1}(Q) \exp\left(\frac{\beta}{4}\,\mathrm{STr}\,(\Lambda Q)\right), \tag{3}$$
где $\beta = -i(\omega + i\delta)\pi\nu V$.

Функция ψ удовлетворяет интегральному уравнению
$$\psi(Q) = \int \exp\left(-\,\mathrm{STr}\left(\frac{\alpha}{8}(Q - Q')^2 - \frac{\beta}{4}\Lambda Q'\right)\right)\psi^m(Q')\,dQ'. \tag{4}$$

В формуле (4) величина α связана со взаимодействием ближайших соседей J соотношением $\alpha = 8J$.

В выражениях (3, 4) производится интегрирование по всем суперматрицам Q вида (2). Случай $m = 1$ соответствует одномерной цепочке гранул. При $\alpha \gg 1$ – это модель неупорядоченной проволоки. В таком пределе интегральное уравнение становится дифференциальным. Соответствующие вычисления проведены в [7], где доказана локализация и вычислена диэлектрическая проницаемость.

Симметрия суперматрицы Q зависит от присутствия магнитных и спин-орбитальных взаимодействий. Наиболее простыми вычисления оказываются в случае, когда имеются магнитные взаимодействия, но отсутствуют спин-орбитальные. В этом случае матрица $\hat{\theta}$ в (2) имеет вид

$$\hat{\theta} = \begin{pmatrix} \theta & 0 \\ 0 & i\theta_1 \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Как и в работе [7], ищем решение, зависящее только от переменных θ_1 и θ. Интегрируя по всем остальным переменным в (3, 4), получаем

$$K(r,r) = \pi^2 \nu^2 \int_{-1}^{1} \int_{1}^{\infty} \frac{\lambda_1 + \lambda}{\lambda_1 - \lambda} \psi^{m+1}(\lambda_1, \lambda) e^{\beta(\lambda - \lambda_1)} d\lambda d\lambda_1 \tag{6}$$

$$\frac{\psi(\lambda, \lambda_1) - 1}{\lambda_1 - \lambda} = \int_{-1}^{1} \int_{1}^{\infty} L(\lambda, \lambda_1; \lambda', \lambda'_1) \frac{(e^{\beta(\lambda' - \lambda'_1)} \psi^m(\lambda', \lambda'_1) - 1)}{\lambda'_1 - \lambda'} d\lambda' d\lambda'_1, \tag{7}$$

где

$$L(\lambda, \lambda_1; \lambda', \lambda'_1) = \frac{\alpha^2}{2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{d}{d\alpha} e^{\alpha \mathbf{n}\mathbf{n}'} \right) e^{-\alpha \mathbf{n}_1 \mathbf{n}'_1} - e^{+\alpha \mathbf{n}\mathbf{n}'} \frac{d}{d\alpha} (e^{-\alpha \mathbf{n}_1 \mathbf{n}'_1}) \right] \frac{d\varphi' d\varphi'_1}{(2\pi)^2},$$

$$\mathbf{n} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta), \quad \mathbf{n}' = (\sin\theta' \cos\varphi', \sin\theta' \sin\varphi', \cos\theta'),$$

$$\mathbf{n}_1 = (i\,\mathrm{sh}\,\theta_1 \cos\varphi_1,\ i\,\mathrm{sh}\,\theta_1 \sin\varphi_1, \mathrm{ch}\,\theta_1), \quad \mathbf{n}'_1 = (i\,\mathrm{sh}\,\theta'_1 \cos\varphi'_1,\ i\,\mathrm{sh}\,\theta'_1 \sin\varphi'_1, \mathrm{ch}\,\theta'_1),$$

$$\lambda = \cos\theta, \quad \lambda_1 = \mathrm{ch}\,\theta_1, \quad \lambda' = \cos\theta', \quad \lambda'_1 = \mathrm{ch}\,\theta'_1.$$

Выражения (6, 7) полностью решают задачу о нахождении коррелятора плотностей. Интегрирование по φ' и φ'_1 в выражении для L может быть непосредственно выполнено. Однако, это приводит к более громоздким выражениям, содержащим функции Бесселя. Анализ уравнения (7) и вычисление интеграла (6) позволяют сделать вывод о том, что при $\alpha > \alpha_c$, где α_c – критическое значение, система является проводящей. В критической точке α_c проводимость скачком обращается в нуль. Величина скачка может быть получена только численно. При $\alpha < \alpha_c$ проводимость равна нулю. В этой области диэлектрическая проницаемость растет при увеличении α и достигает при α_c максимального значения. При произвольных m величину максимальной диэлектрической проницаемости также можно определить лишь численно. Величина α_c является решением уравнения

$$m \sqrt{\frac{2\alpha_c}{\pi}} \left[\left(\mathrm{ch}\,\alpha_c - \frac{1}{2} \frac{\mathrm{sh}\,\alpha_c}{\alpha_c} \right) K_0(\alpha_c) + \mathrm{sh}\,\alpha_c K_1(\alpha_c) \right] = 1, \tag{8}$$

где K_0 и K_1 – модифицированные функции Бесселя.

Аналитические выражения для коррелятора плотностей при произвольных m могут быть получены лишь в пределах $\alpha \ll \alpha_c$ и $\alpha \gg \alpha_c$. При $\alpha \gg \alpha_c$ коррелятор $K(r,r)$ равен

$$K(r,r) = \frac{\pi^2 \nu^2}{D}, \qquad D = \frac{m^2 - 1}{m} \alpha. \tag{9}$$

В обратном предельном случае $\alpha \ll \alpha_c$ соответствующее выражение имеет вид

$$K(r,r) = \frac{\pi \nu}{-i(\omega + i\delta)}, \quad \frac{1}{\kappa V}, \quad \kappa = 1 + \frac{1}{2}(m+1)\sqrt{\frac{\alpha\pi}{2}} + \frac{\alpha(m+1)m}{8} \ln(1/\alpha). \tag{10}$$

Величины D и κ в (9, 10) пропорциональны соответственно коэффициенту диффузии и диэлектрической восприимчивости. Отметим неаналитическую зависимость κ от α при $\alpha \ll \alpha_c$.

Вывод о существовании минимальной металлической проводимости находится в резком противоречии с предсказаниями, полученными методом ренормализационной группы. По мнению автора, такое расхождение не является следствием какой-то специфики модели на дереве Кэйли. Если это утверждение правильно, основные положения метода ренормализационной группы должны быть пересмотрены. Более подробная статья будет опубликована в другом месте.

Автор благодарен А.И.Ларкину за многочисленные обсуждения.

Литература

1. *Anderson P.W.* Phys. Rev.,1958, **109**, 1492.

2. *Mott N.F.* 1974, Metal Insulator Transitions (Taylor and Francis, London, 1974).

3. *Abrahams E., Anderson P.W., Licciardello D.C., Ramakrishnan T.V.* Phys. Rev. Lett., 1979, **42**, 673.

4. *Efetov K.B.* Adv. in Phys. 1983, **32**, 53. *Ефетов К.Б.* ЖЭТФ, 1982, **82**, 872; ЖЭТФ, 1982, **83**, 833.

5. *Abou-Chacra R., Anderson P.W., Thouless D.J.* Journal of Phys.,1973, **6**, 1734.

6. *Shapiro B.* Phys. Rev. Lett., 1983, **50**, 747.

7. *Ефетов К.Б., Ларкин А.И.* ЖЭТФ, 1983, **85**, 764.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
23 мая 1984 г.