

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Самосогласованная теория локализации в узельном и волновом представлениях

А.И. Олемской

В рамках квантово-статистической теории рассмотрена взаимная дополнительность узельного приближения Андерсона и волнового подхода Эдвардса. Первое используется для описания одиночестичных возбуждений. На основе анализа перестановочной симметрии волновой функции показано, что симметрия гамильтониана Андерсона выше симметрии конфигурационного пространства. Переход системы в делокализованное состояние представлен в рамках теории квазисредних как фазовый переход $2 + \delta$ рода, где $\delta \rightarrow 0$ — добавка, отражающая наличие логарифма. Исследование коллективной моды достигается в рамках волнового представления Эдвардса. Рассмотрение сводится к определению автокорреляционной функции распределения заряда, которая с помощью цепочки Мори выражается через высшие корреляторы плотности тока и обобщенной силы. Найдены зависимости проводимости и поляризуемости от ширины разброса уровней и положения уровня Ферми. Проанализирован вид частотной зависимости проводимости и характер пространственной дисперсии.

PACS numbers: 73.20.Jc, 71.25.-s, 67.40.Db

Содержание

1. Введение (697).
2. Узельное приближение Андерсона (698).
3. Волновое представление Эдвардса (705).
4. Заключение (713).

Список литературы (715).

1. Введение

К настоящему времени выяснилось, что полное описание локализации квантовой частицы в случайном поле может быть достигнуто в рамках двух подходов — полевого и статистического. Первый из них основывается на преобразовании Хаббарда–Стратоновича, позволяющем выразить экспоненту от квадратичной формы через экспоненту от линейной за счет интегрирования по эффективному полю, к исследованию которого и сводится дальнейшее рассмотрение. Изложению полевого подхода посвящен недавний обзор [1], и здесь мы будем иметь в виду только статистическую теорию, основывающуюся на исходной постановке задачи Андерсоном [2]. При этом полевые переменные представляют реальный фермion, а не фиктивное поле.

Начиная с момента своего появления модель Андерсона также развивалась в двух основных направлениях. Первое, предложенное Андерсоном [2], основывается на узельном (локаторном) представлении, а второе, связанное с именем Эдвардса [3], — на волновом (пропагаторном). Соответственно в рамках узельного подхода Андерсона роль исходного (неупорядоченного) состояния играет локализованное, а переход состоит в образовании зоны делокализованных состояний. Использование волнового подхода Эдвардса, напротив, предполагает, что исходным является делокализованное состояние, а перестройка системы связана с локализацией.

С методической точки зрения в теории локализации можно выделить скейлинговые теории [4–6], использование метода реплик [7, 8], суперсимметричный подход [9, 10], диаграммные методы [11–15], метод связанных мод [16, 17]. Исследовалось также влияние межэлектронного взаимодействия на характеристики системы, претерпевающей переход Мотта [1, 15]. В большинстве этих работ рассматривалось поведение коллективных возбуждений в представлении Эдвардса. Это объясняется, очевидно, тем, что определение основных экспериментально измеримых величин (типа проводимости и поляризации) наиболее естественным образом достигается в рамках такого подхода.

В своем изложении мы основываемся на дуализме модели Андерсона, состоящем в возможности ее описания как в рамках узельного, так и волнового представлений. Изложению первого посвящен раздел 2, волновое представление рассмотрено в разделе 3. Заключительный раздел 4 посвящен сопоставлению этих подходов и обсуждению проблем и перспектив их совместного

А.И. Олемской. Сумський державний університет,
244007 Суми, вул. Римського-Корсакова 2, Україна
Тел. (0542) 33-34-65
E-mail: sgu@sgu.ts.kiev.ua

Статья поступила 27 февраля 1996 г.

использования. В такой постановке проблема локализации, насколько известно, до настоящего времени не рассматривалась.

Наряду с указанным дуализмом следует отметить, что возможность представления перехода Андерсона нелинейной σ -моделью [7, 8] указывает на наличие эффективного взаимодействия в одиночичной задаче со случайным потенциалом. В этой связи возникает вопрос о его природе. Здесь также оказываются возможными два подхода: локаторное представление, основывающееся на схеме Андерсона, и пропагаторное приближение Эдвардса.

В рамках первого возмущение системы связано с перекрытием волновых функций. Оказывается (см. раздел 2), что гамильтониан Андерсона имеет вырождение относительно перестановочной симметрии узельной волновой функции системы [18]. При снятии этого вырождения одиночичная задача сводится к узельному аналогу модели БКШ в теории сверхпроводимости. Соответственно потеря эргодичности при переходе Андерсона описывается по аналогии с фазовым превращением $2 + \delta$ рода, где $\delta \rightarrow 0$ — обусловленная резонированием узлов добавка, отвечающая логарифмической особенности [19]. В заключение раздела 2 показано, что локаторный подход позволяет представить не только одиночичные особенности, но и описать коллективную моду диффузии частицы в случайном потенциале. Самосогласованное рассмотрение двухчастичной гривинской функции $\varphi(\mathbf{k}, z)$ показало [14], что в пределе малых значений волнового вектора \mathbf{k} и частоты z коллективных возбуждений она имеет характерную особенность $\varphi \propto (z + iD\mathbf{k}^2)^{-1}$, полюс которой определяется коэффициентом диффузии D .

В рамках пропагаторного подхода роль возмущения играет случайный потенциал. Диаграммное исследование [11–15] коллективной моды позволило не только представить диффузионный полюс функции $\varphi(\mathbf{k}, z)$, но и доказать, что нулевые значения коэффициента диффузии обеспечиваются не лестничной последовательностью, члены которой взаимно уничтожаются, а веерными диаграммами, получающимися из лестничных поворотом дырочного пропагатора. Однако подход [11–15] описывает только предел слабой связи ($W \ll W_c$) для систем различной размерности. Рассмотрение всего интервала значений W для трехмерной системы достигается в рамках эквивалентного метода связанных мод [16, 17], изложению которого посвящен раздел 3. Этот метод основывается на технике Цванцига–Мори, где коррелятор $\varphi(z)$ плотности электронов выражается в виде цепной дроби второго порядка, ядро которой описывает эффекты памяти. Приближение связанных мод состоит в том, что функция памяти $M(z)$ выражается через исходный коррелятор $\varphi(z)$ в виде линейного соотношения $M(z) = \lambda\varphi(z)$, где эффективная константа связи $\lambda \propto W^2$ определяется шириной W разброса энергетических уровней, причем именно отсутствие взаимодействия обеспечивает линейный характер связи $M \propto \varphi$. Самосогласованное исследование системы показывает [17], что в статическом пределе $z \rightarrow 0$ частотные зависимости $D(z)$, $g(z)$ коэффициента диффузии и сжимаемости имеют следующий вид: $D(z) = \text{const} \equiv D$, $g(z) = i(n/m)D/z$ — в делокализованном состоянии; $g(z) = \text{const} \equiv g$, $D(z) = -i(m/n)gz$ — в локализованном (здесь m, n — масса и объемная концентрация частиц).

При этом статические константы D, g вблизи критического разброса уровней W_c ведут себя корневым образом.

2. Узельное приближение Андерсона

Рассмотрим газ невзаимодействующих фермионов при нулевой температуре. Для определенности будем иметь в виду трехмерный газ электронов с зарядом $e = 1$, плотностью n и массой m .

Изложим сначала качественное решение задачи. Пусть N_0 атомов примеси расположены в узлах \mathbf{r}_i правильной решетки и имеют энергетические уровни ε_i , распределенные по закону $P_i = P(\varepsilon_i)$, где функция $P(\varepsilon)$ имеет куполообразный вид с шириной W и значением $\bar{\varepsilon} = N_0^{-1} \sum_i \varepsilon_i e$ в центре купола. При перекрытии узельных волновых функций $\varphi_i^l(\mathbf{r}) = \varphi_{\varepsilon_i}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$, характеризуемом интегралом $J_{ij}^m = \int \varphi_i^{l*}(\mathbf{r}) \varphi_j^m(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$, спектр E_v системы не сводится к исходному набору ε_i , а функция распределения $g = g(E_v)$ не совпадает с распределением изолированных уровней $P_i(\varepsilon)$. В отсутствии перекрытия ($J_{ij}^m = 0$) волновая функция $\Phi_E(\mathbf{r})$ одноэлектронного состояния $E = E_v$ имеет вид

$$\Phi_E(\mathbf{r}) = \sum_i a_E^i \varphi_i^l(\mathbf{r}). \quad (1)$$

При этом реализуется локализованное состояние, в котором электрон, первоначально помещенный в узел l , остается в нем неограниченно долго. Это означает, что в (1) из всех коэффициентов ненулевым является только один: $a_E^l = \delta_{E\varepsilon_l}$. Перекрытие волновых функций $\varphi_i^l(\mathbf{r})$ приводит к качественной перестройке системы. Для выяснения ситуации рассмотрим два соседних узла \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 с уровнями $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ и интегралом перекрытия $J_{12}^l \equiv J$. Состояния электрона на этих узлах определяются волновыми функциями

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= u\varphi_1 - v\varphi_2, \\ \Phi_1 &= u\varphi_2 + v\varphi_1, \\ u^2 \\ v^2 \end{aligned} \left. \right\} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\epsilon} \right), \quad \epsilon \equiv [(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + J^2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2]^{1/2}, \quad (2)$$

которым отвечают энергии $E_{0,1} = (1/2)[(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \mp \epsilon]$ (здесь для краткости введены обозначения $u \equiv a_{E_0}^1 = a_{E_1}^2$, $v \equiv -a_{E_0}^2 = a_{E_0}^1$; $\varphi_1 \equiv \varphi_1^l(\mathbf{r})$, $\varphi_2 \equiv \varphi_2^l(\mathbf{r})$, $l = 1, 2$). При $|(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/J| \gg 1$ перекрытие узельных функций пренебрежимо мало, и состояния электрона на паре сводятся к состояниям на изолированных узлах. В обратном случае $|(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/J| \leq 1$ узельное представление теряет смысл и можно говорить лишь о состояниях на паре связанных узлов (ПСУ). Для изолированной ПСУ реализуется низкоэнергетическое состояние E_0 , определяемое волновой функцией Φ_0 .

Приведенная задача показывает, что наличие ПСУ коренным образом изменяет характер системы. Так, если в их отсутствии каждому узлу отвечает единственное значение ε_i , то появление ПСУ приводит к расщеплению ε_i на два уровня E_v ($v = 0, 1$), а из одноэлектронной функции (1) выделяется отвечающая им составляющая $\Phi_v(E, \mathbf{r})$. Объединение \mathcal{N} ПСУ в кластер обуславливает возрастание числа слагаемых (1), входящих в кластерную составляющую $\Phi_v(E, \mathbf{r})$ от 2 до $2\mathcal{N}$, причем для $\mathcal{N} \gg 1$

узельные состояния $\varphi_i^l(\mathbf{r})$ перестраиваются в блоховские $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$. В результате волновая функция состояния E принимает вид

$$\begin{aligned} \Phi_E(\mathbf{r}) &= \sum_c \sum_{\mathbf{k}} b_{vc}^{\mathbf{k}}(E) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_i' a_E^i \varphi_i^l(\mathbf{r}) \equiv \\ &\equiv \Phi_v(E, \mathbf{r}) + \Phi'_E(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3)$$

где суммирование по c выполняется по N_c кластерам, волновой вектор \mathbf{k} пробегает N_c значений, отвечающих числу ПСУ в данном кластере c ; штрих у знака суммы по i означает, что суммирование выполняется лишь по несвязанным узлам. В соответствии с (3) функция распределения электронных состояний $g(E) = \int |\Phi_E(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ записывается в виде

$$g(E) = 2S(E) + AP(\varepsilon - \bar{\varepsilon}), \quad (4)$$

где зависимость $2S(E) = \sum_v \int |\Phi_v(E, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ описывает распределение ПСУ, а $P(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$ — распределение изолированных узлов; коэффициент A и вид зависимости $S(E)$ определяются соотношением между шириной разброса уровней W и характерным значением $I \equiv \int \delta$ интеграла перекрытия, измеренного в энергетических единицах. При $W \gg |I|$, когда содержание ПСУ незначительно и они являются, как правило, изолированными, имеем $A \approx 1$, $S(E) \approx BP(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$, где определяемый конечным числом ПСУ N_c коэффициент $B \sim N_c/N_0$ в макроскопическом пределе $N_0 \rightarrow \infty$ исчезающical мал. Следовательно, при $W \gg |I|$ распределение состояний $g(\varepsilon) \approx P(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$ задается, в основном, суперпозицией узельных состояний (1); соответственно энергия основного состояния определяется суммой уровней ε_i и составляет примерно $\bar{\varepsilon}N_0$. С уменьшением разброса уровней число ПСУ возрастает и они образуют связанные кластеры, оптимальный из которых содержит N_c ПСУ, отвечает энергии E_c и содержит в объеме N_c раз. Образование кластеров ПСУ приводит к отличию вида распределений $2S(E)$ и $P(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$, состоящему в выделении максимумов $S(E) \sim N/N_0$, $N = N_c N_c$ при $E \sim E_c$; энергия основного состояния уменьшается при этом на величину $\sim |I|N$, пренебрежимо малую по сравнению с макроскопическим значением $\bar{\varepsilon}N_0$. С дальнейшим уменьшением W число N_c ПСУ в кластере, а также число кластеров N_c , отвечающих энергии E_c , возрастают, пока полное число $N = N_c N_c$ ПСУ, заключенных в них, не составит конечную часть от количества узлов N_0 : $2N/N_0 \rightarrow \eta^2 \neq 0$ при $N_0 \rightarrow \infty$. При этом максимум зависимости $S(E)$ становится все более высоким и узким, принимая при критическом разбросе уровней W_c вид $2S(E) \sim \eta^2 \delta(E - E_c)$. Появление δ -образного пика указывает на начало бозе-Эйнштейновской конденсации ПСУ и, следовательно, на переход в делокализованное состояние, образование которого приводит к уменьшению энергии основного состояния на макроскопическую величину $\sim |I|N = |I|\eta^2 N_0/2$.

Введенные выше ПСУ являются композитными бозе-частицами, состоящими из двух фермионов. При большом разбросе уровней, когда их число мало, ПСУ можно рассматривать как бесструктурные бозоны, между которыми действуют силы отталкивания (действительно, в делокализованном состоянии ПСУ невыгодно объединяться в бесконечный кластер, что можно толковать как их эффективное отталкивание). При конечном числе ПСУ поведение системы определяется оптимальным класте-

ром (или, иными словами, использованной Андерсоном [2] наиболее вероятной функцией Грина). Следовательно, в подходе, предполагающем в качестве исходного (неупорядоченного) состояния локализованное состояние, должен использоваться узельный гамильтониан Андерсона [2]. Именно такая версия изложена ниже.

Если за исходное принимается делокализованное состояние, то ПСУ выгодно образовывать бесконечный кластер, что можно связать с их притяжением. Однако последнее не приводит к неустойчивости основного состояния системы, так как здесь плотность ПСУ настолько велика, что проявляется их структура и в силу принципа Паули, действующего между фермионами, из которых состоят ПСУ, появляется отталкивание, уравновешивающее "бозевское притяжение" между ними¹. Формально это можно учесть [7], заменяя коммутирующие поля антисимметрическими. При этом используется подход Эдвардса [3], основанный на волновом представлении.

Согласно [2, 12] описание перехода Андерсона требует суммирования бесконечных рядов расходящихся членов, возникающих в силу нарушения эргодичности. В рамках подхода Эдвардса эта трудность будет обойдена (см. раздел 3) изначальным изменением полносной структуры функции релаксации с последующей процедурой самосогласования методом связанных мод [16]. Иными словами, изначально закладывается возможность перестройки фазового пространства системы. Аналогичная ситуация имела место в теории сверхпроводимости, где перестройка основного состояния обусловлена наличием куперовских пар [20]. В этой связи напрашивается вывод, что гамильтониан Андерсона, действующий в пространстве узельных волновых функций, также должен быть заменен некоторым эффективным гамильтонианом, определенным на функциях, отвечающих устойчивому основному состоянию. Впервые такой гамильтониан был предложен в [18], последовательное решение получено в [19].

Изложенная выше качественная картина перехода Андерсона показывает, что делокализация электронного состояния E выражается в разделении (3) соответствующей волновой функции $\Phi_E(\mathbf{r})$ на составляющие $\Phi_v(E, \mathbf{r})$, $\Phi'_E(\mathbf{r})$ связанных и несвязанных узлов. Первая из них представляет суперпозицию квазиблоховских состояний $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, вторая — узельных $\varphi_i^l(\mathbf{r})$. При заданном числе ПСУ N доля первых имеет порядок $2N/N_0 = \eta^2$, вторых $1 - 2N/N_0 = 1 - \eta^2$. Характерная особенность составляющей $\Phi'_E(\mathbf{r}) = \sum_i a_E^i \varphi_i^l(\mathbf{r})$ состоит в наличии свободного (несуммируемого) индекса l у узельных функций $\varphi_i^l(\mathbf{r})$. Физически это означает, что набор уровней ε_i может быть неоднозначным образом распределен по узлам \mathbf{r}_i , в связи с чем система несвязанных узлов обладает симметрией относительно группы G' , состоя-

¹ Разумеется, в делокализованном состоянии ПСУ не следует понимать слишком буквально — как некоторые квазимолекулы, состоящие из двух резонансных узлов. Действительно, если для настоящей молекулы энергия связи входящих в нее частиц намного больше энергии взаимодействия между молекулами, то для ПСУ интеграл перекрытия для узлов, входящих в ПСУ, имеет тот же порядок, что и интеграл перекрытия для соседних узлов, входящих в различные ПСУ. Поэтому следует представлять весь коллектив связанных узлов, в котором узлы постоянно связываются в различных комбинациях в комплексы ПСУ, играющие роль квазичастиц, подчиняющихся статистике Бозе.

щей из $N'!$, $N' = N_0 - 2\mathcal{N} = N_0(1 - \eta^2)$, перестановок узлов \mathbf{r}_l по уровням ε_i . Набор функций $\Phi'_E(\mathbf{r})$, отвечающих различным расстановкам \mathbf{r}_l по ε_i , осуществляет базис группы G' . В отсутствии перекрытия группа G' сводится к полной группе G из $N_0!$ перестановок, а конфигурационное пространство системы определяется набором из $N_0!$ функций (1). Связывание $2\mathcal{N} = \eta^2 N_0$ узлов в кластер приводит к редукции полной группы G в ее подгруппу G' , степень которой определяется параметром η : при $\eta = 0$ в макроскопическом приближении (т.е. с точностью до слагаемых $N_0^{-1} \rightarrow 0$) группы G' и G совпадают, а при $\eta = 1$ группа G' сводится к единичному элементу. Параметр η , принимающий значение $\eta = 0$ в локализованном состоянии и $0 < \eta \leq 1$ в делокализованном, отвечает обычному определению параметра порядка в теории фазовых переходов. Характеризуемое полной группой G локализованное состояние является высокосимметричным и отвечает неупорядоченной фазе ($\eta = 0$), а задаваемое ее подгруппой G' низкосимметричное делокализованное состояние — упорядоченной фазе ($\eta \neq 0$).

Таким образом, перекрытие узельных волновых функций приводит к разбиению полного конфигурационного пространства $\{\Phi\}$, составленного из $N_0!$ перестановок узлов l в (1), на подпространства $\{\Phi_v\}$, $\{\Phi'\}$, отвечающие связанным и несвязанным узлам. Характерно, что в первом из них система может находиться в состояниях $v = 0, 1$, хотя наиболее вероятным является отвечающее наименьшей энергии E_0 состояние Φ_0 . Одноэлектронный гамильтониан задачи

$$H = \sum_i \varepsilon_i \psi_l^{+i} \psi_m^i + \sum_{l \neq m} I_{ij}^{lm} \psi_l^{+i} \psi_m^j \equiv H_0 + V \quad (5)$$

обладает симметрией относительно перестановок полной группы G ². Таким образом, мы сталкиваемся здесь с обычной ситуацией в теории фазовых переходов, когда симметрия конфигурационного пространства системы с заданными граничными условиями оказывается ниже симметрии гамильтониана. Для снятия такого вырождения учтем, что равновесное состояние системы реализуется не на всем пространстве $\{\Phi\}$, а на его части $\{\Phi_0\} \otimes \{\Phi'\}$. Поэтому из (5) следует выделить эффективный гамильтониан, определенный на соответствующем базисе. В двухуровневом приближении, означающем наличие двух возможных состояний Φ_v , $v = 0, 1$, это достигается введением операторов проектирования:

$$|\Phi_0\rangle = P|\Phi\rangle, \quad |\Phi_1\rangle = Q|\Phi\rangle, \quad P + Q = 1. \quad (6)$$

Принимая $|I_{ij}^{lm}| \ll W$, оператор V в (5) можно рассматривать как возмущение³, тогда эффективный гамильтониан выражается в виде следующего ряда [21]:

$$H_{\text{eff}} = PH_0P + \sum_{n=0}^{\infty} PV \left(\frac{QV}{\mathcal{E}_1 - H_0} \right)^n P, \quad (7)$$

² Интересно отметить, что в одноуровневом слагаемом H_0 производятся перестановки узлов l, m по фиксированным уровням i , а в межузельном члене V — перестановки уровней i, j по узлам l, m .

³ Взаимная дополнительность подходов Эдвардса и Андерсона видна уже из того, что в [17] роль возмущения играет потенциальная энергия носителей, а в (5) — энергия пересека.

где \mathcal{E}_0 — энергия системы в состоянии Φ_0 . Отсюда, принимая во внимание лишь перекрытие z ближайших соседей, для гамильтониана $H' = H_{\text{eff}} - \lambda N_0$, записанного с учетом смещения $E = \lambda - \bar{e}$ из центра зоны, с точностью до $(zI/W)^2 \ll 1$ получаем [18]

$$H' = \sum_l (\varepsilon_l - \lambda) a_l^+ a_l - \frac{V}{N_0} \sum_{lm} a_l^+ b_l^+ b_m a_m. \quad (8)$$

Здесь принято, что интеграл перекрытия $I \equiv I_{ij}^{lm}$ не зависит от $l, m, i, j; \lambda$ — химический потенциал локализованных частиц (не путать с энергией Ферми μ), $V = N_0(zI)^2 / (\mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0)$ — эффективная константа связи, \mathcal{E}_1 — энергия системы в состоянии Φ_1 ; операторы a_l^+ , a_l рождения и уничтожения частиц в состоянии Φ_0 и операторы b_l^+ , b_l соответствующих античастиц в состоянии Φ_1 определяются равенствами

$$\begin{aligned} a_l^+ &= \sum_i P_i \psi_l^{i+}, & a_l &= \sum_i \psi_l^i P_i; \\ b_l^+ &= \sum_i \psi_l^i Q_i, & b_l &= \sum_i Q_i \psi_l^{i+}, \end{aligned} \quad (9)$$

где P_i, Q_i — операторы проектирования на уровне i , входящие в полные операторы P, Q в виде произведений; операторы в "узле" \bar{l} , соседнем по отношению к данному l , имеют вид $b_{\bar{l}} = z^{-1} \sum_m b_{l+m}$, где суммирование проводится по ближайшим соседям.

Таким образом, спонтанное нарушение симметрии относительно перестановок уровней ε_i по узлам \mathbf{r}_l , состоящее в переходе от группы G в локализованном состоянии к ее подгруппе G' в делокализованном, приводит к задаче об эффективной системе взаимодействующих частиц и античастиц фермиевского типа⁴. Характер этого взаимодействия не зависит от знака интеграла перекрытия и задается лишь знаком разности $\Delta\mathcal{E} \equiv \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0 > 0$ энергий системы в состояниях Φ_1 и Φ_0 . Отметим, что появление эффективного взаимодействия в системах, где изначально заложено только перекрытие волновых функций, присущее не только модели Андерсона, но и модели спинового стекла. Анализ последней [23] основывается на методе реплик, в рамках которого эффективное взаимодействие появляется в результате усреднения по распределению случайного интеграла перекрытия (при этом величина взаимодействия оказывается пропорциональной квадрату его дисперсии). Укажем, что в методе реплик эффективное взаимодействие является результатом математического трюка и не имеет конкретного физического содержания. Что касается излагаемого подхода, то здесь оно носит обменный характер и обусловлено нарушением перестановочной симметрии системы.

Переходя к изложению формализма, основывающегося на эффективном гамильтониане (8), отметим, что по своему виду последний совпадает с модельным гамильтонианом Бардина–Купера–Шраффера с тем отличием, что вместо импульсного представления используется узельное, а роль электронов с противоположными импульсами и спинами играют частицы и античастицы

⁴ В принципе, такая ситуация не является новой: так, спонтанное нарушение симметрии в модели Хиггса [22] приводит к возникновению массы векторных полей. В нашем случае понижение перестановочной симметрии приводит к взаимодействию обменного типа.

на "соседних" узлах. Подобно [24] можно показать, что при $N_0 \rightarrow \infty$ поведение системы асимптотически определяется аппроксимирующим гамильтонианом, имеющим в приближении самосогласованного поля вида

$$\mathcal{H} = \sum_l (\epsilon_l - \lambda) a_l^+ a_l - \frac{V}{2} \sum_l \left(\eta^* b_{\bar{l}} a_l + \eta a_l^+ b_{\bar{l}}^+ \right) + \frac{V}{4} |\eta|^2 N_0. \quad (10)$$

Аномальные квазисредние

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{2}{N_0} \sum_l \langle b_{\bar{l}} a_l \rangle \equiv \frac{2}{N_0} \sum_{il} \langle Q_i \psi_{\bar{l}}^{i+} \psi_l^i P_i \rangle, \\ \eta^* &= \frac{2}{N_0} \sum_l \langle a_l^+ b_{\bar{l}}^+ \rangle \equiv \frac{2}{N_0} \sum_{il} \langle P_i \psi_l^{i+} \psi_{\bar{l}}^i Q_i \rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

определенные амплитуду перехода частицы из состояния Φ_0 на узле l в состояние Φ_1 на "соседнем" узле \bar{l} (и обратно — для η^*), представляют параметр порядка, соответствующий делокализованному состоянию. С точностью до множителя $(N_0/2)^{1/2}$ величины η^*, η совпадают с конденсатной частью операторов ПСУ $\Psi_l^+ = a_l^+ b_{\bar{l}}^+, \Psi_l = b_{\bar{l}} a_l$, определяющих моду колективных возбуждений при нулевом квазимпульсе:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(\mathbf{k} = 0) \rangle &= \left(\frac{2}{N_0} \right)^{1/2} \sum_l \langle b_{\bar{l}} a_l \rangle, \\ \langle \Psi^+(\mathbf{k} = 0) \rangle &= \left(\frac{2}{N_0} \right)^{1/2} \sum_l \langle a_l^+ b_{\bar{l}}^+ \rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

Отсюда следует, что бозе-конденсация \mathcal{N} ПСУ, означающая $\langle \Psi(\mathbf{k} = 0) \rangle = \mathcal{N}^{1/2}$, приводит к упорядочению $\eta \equiv (N_0/2)^{-1/2} \langle \Psi(\mathbf{k} = 0) \rangle = (2\mathcal{N}/N_0)^{1/2}$. При этом функция распределения ПСУ по квазимпульсам

$$\frac{N_0}{2} S(\mathbf{k}) \equiv \langle \Psi^+(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}) \rangle \approx \left| \langle \Psi(\mathbf{k}) \rangle \right|^2 \quad (13)$$

приобретает δ -образный пик высотой $S(0) = 2\mathcal{N}/N_0 \equiv \eta^2$. Характерно, что данная особенность появляется именно в связанной с распределением ПСУ двухчастичной функции Грина, а не одночастичной. Это согласуется с результатами скейлинговой теории [25], согласно которой вблизи порога подвижности E_c критическим поведением обладают не сами полевые переменные φ_x^i ($i = 1, 2; \alpha = 1, \dots, n, n \rightarrow 0$ — размер реального пространства), а обусловленный спонтанным нарушением симметрии (переход от группы $O(2n)$ к некомпактной группе $O(n, n)$) тензор $Q_{\alpha\beta}^{ik} = \varphi_\alpha^i \varphi_\beta^k$. Ему отвечает определение (11) параметра порядка в виде среднего от пары операторов a_l, b_l .

Диагонализация гамильтониана (10) достигается преобразованием

$$\alpha_{l+} = u_l a_l - v_l b_{\bar{l}}^+, \quad \alpha_{l-} = u_l b_l + v_l a_{\bar{l}}^+, \quad (14)$$

где $u_l^2 + v_l^2 = 1$. В результате получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = U + \frac{1}{2} \sum_l \epsilon_l (\alpha_{l+}^+ \alpha_{l+} + \alpha_{l-}^+ \alpha_{l-}) + \\ + \frac{1}{2} \sum_l (\epsilon_l - \lambda) (\alpha_{l+}^+ \alpha_{l+} - \alpha_{l-}^+ \alpha_{l-}), \end{aligned} \quad (15)$$

где

$$\begin{aligned} U &= \frac{N_0}{2} \left\{ \frac{V}{2} |\eta|^2 - \frac{1}{N_0} \sum_l [\epsilon_l - (\epsilon_l - \lambda)] \right\}; \\ \epsilon_l &= \sqrt{(\epsilon_l - \lambda)^2 + \Delta^2}, \quad \Delta = V\eta, \quad \eta = \eta^*; \\ \frac{u_l^2}{v_l^2} &= \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\epsilon_l - \lambda}{\epsilon_l} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

Величина U представляет собой энергию основного состояния, волновая функция которого есть

$$|\Psi_0\rangle = \prod_l (u_l + v_l a_l^+ b_{\bar{l}}^+) |0\rangle, \quad (17)$$

где $|0\rangle$ — волновая функция ферми-вакуума. При несовпадении возбуждений, определяемых операторами α_{l+}, α_{l-} , они обладают бесщелевыми законами дисперсии $\epsilon_l^{(\pm)} = (1/2)[\epsilon_l \pm (\epsilon_l - \lambda)]$ и фазовый переход невозможен. Для его реализации в рамках развитой схемы необходимо постулировать совпадение поведения элементарных возбуждений в состояниях Φ_0 и Φ_1 (физически это означает, что появление возбуждения на узле l в состоянии Φ_0 приводит к возбуждению на "соседнем" узле \bar{l} в состоянии Φ_1). Тогда энергия ϵ_l элементарных возбуждений, определяемых оператором $\alpha_l \equiv \alpha_{l+} = \alpha_{l-}$, характеризуется наличием щели Δ , пропорциональной параметру порядка η .

Для дальнейшего развития теории следует придать конкретный смысл операции усреднения $\langle f(\epsilon_l) \rangle \equiv \sum w_l f(\epsilon_l)$, что осуществляется заданием вероятности w_l иметь энергию ϵ_l в узле l . Иными словами, следует построить статистическую теорию распределения уровней ϵ_l . Проделаем это по аналогии с соответствующей теорией [26] термодинамических систем с температурой W .

В модели Андерсона [2] принимается, что уровни N_0 атомов примеси эквидистантно распределены в интервале W так, что расстояние между ними $D = W/N_0 = \text{const}$. Однако зависимость $D(N_0)$, вытекающая из общих статистических соображений (см. § 7 в [26]), должна иметь вид

$$D = W \exp(-sN_0), \quad (18)$$

где s — энтропия, приходящаяся на атом примеси. Для придания $D(N_0)$ реалистического вида необходимо отказаться от условия эквидистантности. Будем характеризовать неравномерность в распределении уровней константой $W = 2(d \ln D(\varepsilon)/d\varepsilon)^{-1}$. Тогда с увеличением ε плотность уровней $P(\varepsilon) \propto 1/D(\varepsilon) \propto \exp(-2\varepsilon/W)$ спадает при $W > 0$ и возрастает при $W < 0$. Примем наиболее естественный и простой случай симметричного распределения

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{W} \exp\left(-\frac{2|\varepsilon - \bar{\varepsilon}|}{W}\right), \quad (19)$$

где $W \geq 0$ играет роль ширины разброса уровней. При $W = 0$ имеем $P(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$.

Зависимость (18) позволяет найти вероятность $w_l \propto \exp S(\varepsilon_l)$ иметь энергию ε_l ($S = sN_0$ — полная энтропия):

$$w_l = \text{const} \exp\left(-\frac{2\varepsilon_l}{W}\right). \quad (20)$$

С формальной точки зрения статистика, задаваемая функцией распределения (20), совпадает со статистикой термодинамической системы с температурой W . Имея в виду эту связь, можно построить статистическую теорию рассматриваемых случайных систем по аналогии с соответствующей теорией термодинамических систем, где роль распределения Гиббса играет зависимость (20). Так, для функции распределения $v_l = \langle a_l^+ a_l \rangle$ элементарных возбуждений, энергия которых $\epsilon_l = [(\varepsilon_l - \bar{\varepsilon})^2 + \Delta^2]^{1/2}$, обычным образом [26] получаем

$$v_l = \left[1 + \exp \frac{2\epsilon_l}{W} \right]^{-1}. \quad (21)$$

Основному состоянию, где $v_l = 0$, отвечает $W = 0$. В противоположном случае $W = \infty$ элементарные возбуждения наполовину заполняют свои зоны ($v_l = 1/2$) и совпадают с задаваемыми операторами a_l, b_l частицами и античастицами. И наконец, при небольших значениях $W (\exp(2\Delta/W) \gg 1)$ равенство (21) принимает вид распределения Больцмана. Функции распределения $n_l = \langle a_l^+ a_l \rangle$, $p_l = \langle b_l^+ b_l \rangle$ взаимодействующих частиц и античастиц связаны с v_e формулой

$$2n_l = 2p_l = 1 - \frac{\varepsilon_l - \bar{\varepsilon}}{\epsilon} (1 - 2v_l), \quad (22)$$

следующей из (14). Используя тождество

$$\sum_i \langle \psi_l^{i+} \psi_m^i \rangle = \langle a_l^+ a_m \rangle + \langle b_l b_m^+ \rangle + \langle b_l a_m \rangle + \langle a_l^+ b_m^+ \rangle, \quad (23)$$

вытекающее из соотношения $P_i + Q_i = 1$, для числа уровней на данном узле, как и следовало ожидать, получаем $N_l \equiv \sum_i \langle \psi_l^{i+} \psi_l^i \rangle = 1$. Переход от найденных узельных функций к соответствующим распределениям по энергии осуществляется умножением на плотность уровней $P(\varepsilon)$, задаваемую равенством (19).

Уравнение для ширины щели получается подстановкой обращенных равенств (14) в определение (11):

$$\frac{V}{W} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tanh(\sqrt{(x - e)^2 + d^2}/2) \exp(-|x|)}{\sqrt{(x - e)^2 + d^2}} dx = 1. \quad (24)$$

Здесь использован переход $\sum_l \dots \rightarrow N_0 \int \dots P(\varepsilon) d\varepsilon$, $d \equiv 2\Delta/W$, $e \equiv 2E/W$, $E \equiv \lambda - \bar{\varepsilon}$ — смещение из центра зоны. В отличие от модели БКШ параметр взаимодействия $V = N\Delta_0^2/\Delta\mathcal{E}$, где $\Delta_0 = z|I|$, не является константой, его значение определяется разностью $\Delta\mathcal{E}$ энергий системы в состояниях Φ_1 и Φ_0 . Для изолированной ПСУ она составляет ϵ_l , а при наличии макроскопической делокализованной фазы $\Delta\mathcal{E} = \sum_l \epsilon_l$. В результате для V имеем

$$V^{-1} = \frac{W}{(2\Delta_0)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{(x - e)^2 + d^2} \exp(-|x|) dx. \quad (25)$$

Скачок полной энергии системы (аналог термодинамического потенциала) $\Delta F = F_d - F_l$ при переходе в делокализованное состояние определяется формулой

$$\Delta F = -\frac{N_0}{4} \int_0^V \frac{\Delta^2}{V^2} dV, \quad (26)$$

вытекающей из равенств $(dF/dV)_{W,\lambda} = \langle \partial\mathcal{H}/\partial V \rangle = \partial U/\partial V$. Согласно (26) при делокализации, как и обычно при переходе в низкосимметричную фазу, величина F уменьшается.

Энергия элементарных возбуждений $\mathcal{E}_{\text{ex}} = \sum_l \epsilon_l v_l$ имеет вид

$$\mathcal{E}_{\text{ex}} = \frac{N_0}{4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{(x - e)^2 + d^2}}{1 + \exp \sqrt{(x - e)^2 + d^2}} \exp(-|x|) dx. \quad (27)$$

Основное состояние системы, определяемое волновой функцией (17), реализуется при $W = 0$, где все уровни совпадают ($P(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \bar{\varepsilon})$), а элементарные возбуждения отсутствуют ($v_l = 0$). В центре зоны ($E = 0$) параметр порядка и ширина щели принимают максимальные значения $\eta = 1$, $\Delta = 1$, энергия основного состояния и скачок полной энергии системы минимальные: $U = \Delta F = -N_0/4$, параметр взаимодействия $V = 1$ (здесь и далее, если не оговорено обратное, величины, имеющие размерность энергии, измерены в единицах $\Delta_0 = z|I|$). Частицы и античастицы наполовину заполняют состояния Φ_0 и Φ_1 ($n_l = p_l = 1/2$). При смещении из центра зоны на величину E имеем $\Delta^2 = \eta^2 = 1 - E^2$, $V = 1$, $\Delta F = -(N_0/4)(1 - E^2)$, $n_l = p_l = (1 + E)/2$. Таким образом, с ростом E параметр порядка, ширина щели и абсолютное значение изменения полной энергии системы при делокализации монотонно спадают, обращаясь в нуль при граничном значении $E_c = 1$. Соответственно число частиц и античастиц возрастает до максимальной величины $n_l = p_l = 1$.

Нетрудно видеть, что описанное основное состояние случайной системы соответствует обычному расплыванию совпадающих энергетических уровней $\varepsilon_l = \bar{\varepsilon}$ в зону делокализованных состояний шириной (в обычных единицах) $2E_c = 2z|I|$. При этом нормированная на единицу плотность делокализованных состояний пропорциональна параметру порядка:

$$g(E) = \frac{2}{\pi} \eta(E) = \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - E^2}. \quad (28)$$

С разбросом уровней появляются элементарные возбуждения, число которых $v_l \sim \exp(-2/W) \ll 1$. С точностью до первых по $W \ll 1$ неисчезающих членов получаем

$$\Delta^2 \approx \eta^2 \approx (1 - E^2) - \frac{W^2}{2}, \quad V \approx 1,$$

$$\Delta F \approx -\frac{N_0}{4} \left[(1 - E^2) - \frac{W^2}{2} \right],$$

$$\mathcal{E}_{\text{ex}} \approx N_0 \exp \left(-\frac{2}{W} \right), \quad E_c \approx 1 + \frac{W^2}{4};$$

$$2n_l = 2p_l \approx \begin{cases} (1 + E) - (1 - E^2)(\varepsilon_l - \bar{\varepsilon}) & \text{при } |\varepsilon_l - \bar{\varepsilon}| \leq \frac{W}{2}; \\ 1 + E & \text{при } |\varepsilon_l - \bar{\varepsilon}| \geq W. \end{cases} \quad (29)$$

Степенной характер (в отличие от обычно наблюдающегося при фазовых переходах экспоненциального) зависимости величин Δ , η , $|\Delta F|$ от разброса уровней W обусловлен зависимостью параметра взаимодействия V от спектра возбуждений. Согласно (29) при малом раз-

брюсе эта зависимость сказывается только с удалением от центра зоны ($E \neq 0$). Для малых смещений ($E < E_{\text{cr}}$) разброс уровней приводит к уменьшению величин Δ , η , $|\Delta F|$, причем отличие параметра взаимодействия $V(W)$ от единицы обуславливает различие в граничных значениях E_{cr} для зависимостей $\eta(W)$ ($E_{\text{cr}} = (5^{1/2} - 1)/2$) и $\Delta(W)$, $\Delta F(W)$ ($E_{\text{cr}} = 2^{-1/2}$). При $E_{\text{cr}} < E < 1$ малый разброс приводит к квадратичному возрастанию величин Δ , η , $|\Delta F|$, которое в самой точке $E = 1$ переходит в линейное. Для $E > 1$ величины η , Δ принимают ненулевые значения лишь при $W > W_0$, где $\eta, \Delta \propto \sqrt{W - W_0}$ (для $\eta(W)$ имеем $W_0^2 = 2(1 - E^{-2}) \ll 1$, а для $\Delta(W)$ уже $W_0^2 = 2(E^2 - 1) \ll 1$); на зависимости $E_c(W)$ это отражается в наличии участка с положительной производной (рис. 1).

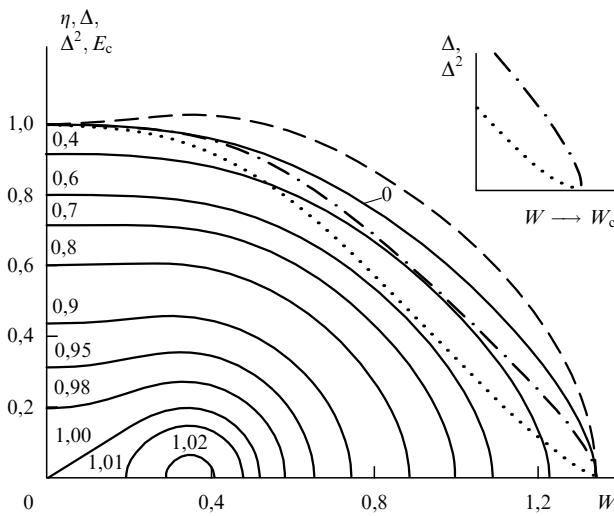


Рис. 1. Зависимость от ширины разброса уровней W щели Δ в спектре одиночных возбуждений (сплошные кривые, цифры у которых указывают смещение E из центра зоны), максимального смещения E_c из центра зоны в делокализованном состоянии (штриховая), параметра порядка η при $E = 0$ (штрихпунктирная) и квадрата ширины щели Δ^2 при $E = 0$ (пунктирная).

Энергия возбуждений \mathcal{E}_{ex} и величина $C_{\text{ex}} = d\mathcal{E}_{\text{ex}}/dW$, определяющая скорость ее возрастания с увеличением разброса уровней (аналог теплоемкости в термодинамике), имеют согласно (27) вид

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{ex}} &\approx N_0(1 - E^2)^{-1} \exp\left(-\frac{2}{W}\right), \\ C_{\text{ex}} &\approx 2N_0(1 - E^2)^{-1} W^{-2} \exp\left(-\frac{2}{W}\right); \\ W &\ll 1, \quad E < 1. \end{aligned} \quad (30)$$

Смещение из центра зоны приводит к степенному возрастанию величин \mathcal{E}_{ex} , C_{ex} , экспоненциальная малость которых обусловлена наличием щели.

При произвольных значениях разброса уровней W и смещения из центра зоны E ширина щели Δ и параметр взаимодействия V (а по ним и параметр порядка $\eta = \Delta/V$) определяются лишь численным решением уравнений (24), (25). Вид получающихся зависимостей приведен на рис. 1, 2. Характерная особенность состоит в обращении в нуль величин Δ , η и изломе зависимости

$V(W)$ при критическом разбросе W_c , максимальное значение которого (в обычных единицах)

$$W_{c0} = 2\sqrt{\ln \frac{\pi}{2}} z|I| = 1,344z|I| \quad (31)$$

достигается при $E = 0$. Полученное значение $W_{c0}/z|I|$ находится в удовлетворительном согласии со значением 3,3, найденным в рамках подхода Эдвардса [13], а также с результатом 2,4 приближения когерентного потенциала [27] и результатом 1,8 локаторного приближения [14]. В отличие от обычно наблюдавшейся при фазовых превращениях зависимости критического поля от температуры в нашем случае зависимость $E_c(W)$ ширины зоны делокализованных состояний от разброса уровней (штриховая кривая на рис. 1) не является монотонно спадающей — при $W < W_m \approx 0,35$ разброс незначительно расширяет зону (для $W^2 \ll 1$ см. (29)), а при $0 \ll (W_{c0} - W)/W_{c0} \ll 1$ быстро сужает ее:

$$E_c \approx 2^{-1/2} W_{c0}^2 \left(1 - \frac{W}{W_{c0}}\right)^{1/2} = 1,277 \left(1 - \frac{W}{W_{c0}}\right)^{1/2}. \quad (32)$$

Немонотонный характер зависимости $E_c(W)$ был установлен впервые в [27].

Согласно (25) возрастание параметра взаимодействия обусловлено уменьшением энергии элементарных возбуждений при росте разброса уровней (за счет спадания $d = 2\Delta/W$), а его уменьшение связано с тривиальным увеличением интеграла в правой части (25), происходящим при росте смещения из центра зоны (при $W < W_c$ превалирует первый фактор, а при $W > W_c$ — второй). В центре зоны ($E = 0$) разброс уровней $W < W_c$ приводит к медленному возрастанию параметра взаимодействия от значения $V_0 = 1$; при конечном смещении $E < 1$ сначала происходит спадание $V(W)$ со степенью выше второй (см. (29)), а затем рост (рис. 2). При $1 < E < E_m$, $E_m \approx 1,02$, на участке $0 \leq W < W_0$, где $W_0^2 \approx 2(E^2 - 1)$, имеем постоянное значение $V = E^{-1}$; в точке $W = W_0$ происходит излом,

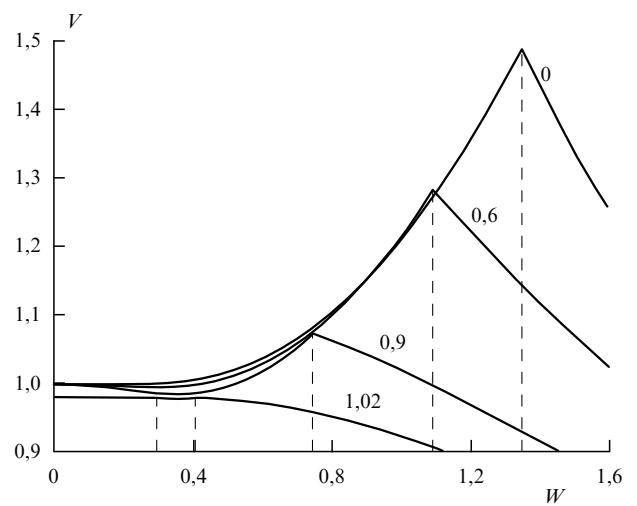


Рис. 2. Зависимость параметра эффективного взаимодействия V от разброса уровней W (цифры у кривых указывают величину E смещения из центра зоны).

после которого V сначала незначительно спадает, а затем возрастает. Вблизи критического разброса $(0 \ll (W_{c0} - W)/W_{c0} \ll 1, (E/W_{c0})^2 \ll 1)$

$$V \approx \frac{2}{W_{c0}} \left[1 - \frac{W_{c0} - W}{W_{c0}} - 2 \left(\frac{E}{W_{c0}} \right)^2 \right]. \quad (33)$$

Выше критической точки ($W > W_c$)

$$V^{-1} = E + \frac{W}{2} \exp\left(-\frac{2E}{W}\right). \quad (34)$$

Обусловленный перестройкой спектра скачок производной dV/dW при $W = W_c$ достигает максимального значения $4/W_{c0} = 2,214$ при $E = 0$ и уменьшается до нуля с ростом E .

Как и обычно при фазовых переходах, ширина щели в центре зоны ($E = 0$) монотонно спадает с разбросом уровней W , который играет в нашей модели роль температуры. Однако при смещении $E \neq 0$ начальный участок зависимости $\Delta(W)$ становится более плоским и, начиная от $E_{cr} = 2^{-1/2}$, сначала происходит уширение, а затем сужение щели (см. сплошные кривые на рис. 1). Качественно отличная от обычной картина наблюдается при больших смещениях ($1 < E < E_m$, $E_m \approx 1,02$): щель раскрывается не от нулевого разброса, а при $W_0 \approx 2^{1/2}(E^2 - 1)^{1/2}$. Указанные отличия обусловлены зависимостью параметра взаимодействия от спектра системы и наиболее ярко проявляются при малых W и в окрестности критической точки. Исключая из (24), (25) параметр V , с точностью до первых по $\Delta/W_{c0} \ll 1$ неисчезающих членов имеем в центре зоны

$$\begin{aligned} \left(\frac{W_{c0}}{W}\right)^2 &\approx \int_0^\infty \sqrt{x^2 + d^2} \exp(-x) dx = \\ &= \frac{\pi}{2} d [H_1(d) - Y_1(d)], \end{aligned} \quad (35)$$

где $H_1(d)$ — функция Струве, $Y_1(d)$ — функция Бесселя второго рода [28]. При $d \ll 1$ имеем $H_1(d) \approx (2/3\pi)d^2$, $Y_1(d) \approx -2/\pi d + (d/\pi) \ln(d/2)$, и из (35) следует

$$\left(\frac{\Delta}{W_{c0}}\right)^2 \ln\left(\frac{\Delta}{W}\right) \approx \frac{W_{c0} - W}{W_{c0}}. \quad (36)$$

Таким образом, в сравнении с обычным фазовым переходом второго рода, где в формуле типа (36) отсутствует логарифм, в рассматриваемых системах спадание Δ вблизи W_c является более медленным: если в первом случае скорость спадания $d\Delta^2/dW$ постоянна, то во втором $d\Delta^2/dW = W_{c0}/\ln(\Delta/W_{c0})$ и при $W \rightarrow W_{c0}$ медленно стремится к нулю. Данное различие не сказывается на графике зависимости $\Delta(W)$, в связи с чем на рис. 1 приведена для сравнения соответствующая $E = 0$ кривая (пунктир) зависимости $\Delta^2(W)$, которая при $W = W_c$ касается оси абсцисс.

Изменение V с разбросом уровней приводит к отличию зависимости $\eta(W)$ от $\Delta(W)$ (ср. штрихпунктирную и сплошную кривые на рис. 1, соответствующие $E = 0$). При $W^2 \ll 1$ параметр порядка определяется равенством (29), а в окрестности критической точки ($0 < (W_{c0} - W)/W_{c0} \ll 1$) при $E = 0$ имеем

$$\left(\frac{\eta}{0,903}\right)^2 \ln\left(\frac{\eta}{0,903}\right) \approx \frac{W_{c0} - W}{W_{c0}}. \quad (37)$$

Обусловленное делокализацией изменение полной энергии $\Delta F = F_d - F_l$ достигает минимального значения (в обычных единицах) $-(N_0 z/4)|I|$ для регулярной системы ($W = 0$) в центре зоны $E = 0$. Поскольку изменение ΔF обусловлено зависимостью $\Delta(W)$, то величина ΔF может как возрастать, так и спадать с разбросом уровней, оставаясь отрицательной ниже критической точки W_c . Последнее означает указанную выше неустойчивость локализованного состояния, обусловленную наличием ПСУ. Вблизи W_{c0} получаем выражение

$$\begin{aligned} \Delta F &\approx \frac{N}{2} \left(\frac{W_{c0}}{2}\right)^3 \left(\frac{\Delta}{W_{c0}}\right)^4 \ln\left(\frac{\Delta}{W_{c0}}\right) = \\ &= 0,228 N_0 \eta^4 \ln(1,107\eta), \end{aligned} \quad (38)$$

отличающееся от обычного наличием логарифма. Данное отличие принципиально в том смысле, что разность "емкостей разброса" $\Delta C = -W^2 \partial \Delta F / \partial W^2$ принимает в критической точке нулевое значение согласно равенству

$$\Delta C \approx -\frac{(N_0/2)(W_{c0}/2)^2}{\ln(\Delta/W_{c0})} = -0,226 \frac{N_0}{\ln(1,107\eta)}, \quad (39)$$

а ее производная по W стремится к $-\infty$. Условно этот факт можно выразить, относя переход в делокализованное состояние к $2 + \delta$ роду, где $\delta \rightarrow 0$ — добавка, обусловленная логарифмом. Ее наличие обусловлено зависимостью параметра эффективного взаимодействия от спектра системы.

Подобно переходу в спиновое стекло найденная особенность может восприниматься как излом (cusp) зависимости $C(W)$ при $W = W_c$. Однако если в спиновом стекле скачок производной dC/dT в точке излома конечен [23], то в нашем случае $\Delta(dC/dW) = -\infty$, и в эксперименте данный излом может восприниматься как скачок самой величины C , а не ее производной.

Аналитическое выражение для суммарной энергии элементарных возбуждений \mathcal{E}_{ex} может быть получено лишь в предельных случаях. При $W^2 \ll 1$ имеем (29), а при $W \geq W_{c0}$, $E = 0$

$$\mathcal{E}_{ex} \approx \frac{\pi^2 - 9}{24} N_0 W = 0,036 N_0 W. \quad (40)$$

Соответственно, для "емкости разброса" $C_{ex} = d\mathcal{E}_{ex}/dW$ получаем $C_{ex} \approx 0,036 N_0$.

Как видно из изложенного, энергия E смещения из центра зоны играет роль поля, сопряженного параметру порядка, ненулевые значения которого реализуются при смещении E , не превышающем критическое значение E_c (см. штриховую кривую на рис. 1). Использованное приближение самосогласованного поля отвечает теории среднего поля, которая, как известно, сводится к феноменологической теории Ландау. Поэтому при рассмотрении поведения физических величин при делокализации можно использовать стандартную теорию фазовых переходов [26] с единственным отличием, что разложение ведется не по η^2 , а по $\eta^2 \ln \eta$; сравнение с полученными здесь результатами позволяет установить микроскопический смысл феноменологических параметров.

Таким образом, теория делокализации может быть построена по аналогии с микроскопической теорией сверхпроводимости [20], где роль параметра порядка

играет квадратный корень отношения числа связанных узлов к их полному числу, а роль сопряженного ему поля — смещение из центра зоны. Существенное отличие от теории БКШ состоит в зависимости параметра эффективного взаимодействия ПСУ от спектра системы. Это приводит к аномальному поведению параметра порядка вблизи критического разброса уровней, которое можно выразить, относя переход в делокализованное состояние к $2 + \delta$ роду, где $\delta \rightarrow 0$ — добавка, отражающая наличие логарифмического множителя. При этом полная энергия системы является неаналитической функцией параметра порядка и не может быть разложена в ряд по его степеням (см. (38)).

Основными предпосылками, позволившими развить данную теорию, являются учет обусловленной наличием ПСУ перестройки основного состояния системы и отказ от молчаливо подразумеваемого предположения о постоянстве вероятности заполнения уровней. Первое позволило привести гамильтониан задачи к виду БКШ, а второе — свести усреднение к процедуре типа используемой в статистической физике. Разумеется, для плотности распределения уровней вместо (19) можно использовать любую другую однопараметрическую функцию, определяющую куполообразную кривую. Однако вид (20) вероятности заполнения уровней является принципиальным в том смысле, что именно (20) позволяет использовать обычный аппарат квантовой статистики. Наш выбор для плотности распределения уровней функции (19), совпадающей по своему виду с вероятностью заполнения уровней (20), обусловлен тем, что обе эти функции обратно пропорциональны расстоянию между уровнями.

Выше мы использовали простейший метод квазисредних [24]. Разумеется, полученная картина одночастичных возбуждений может быть построена и в рамках гриновского формализма [29]. Его преимущество состоит в том, что достигается описание не только одиночных возбуждений, но и представляется поведение коллективной диффузионной моды. Следуя локаторному подходу [14], кратко опишем схему такого представления.

Как известно [29], основой этой схемы является гриновская функция электрона G и вершинная функция Γ , связанная с гриновской функцией коллективных возбуждений φ соотношением $\Gamma = -2\pi i\varphi$. Первая из них подчиняется уравнению Дайсона, которое в рамках локаторного подхода, где роль возмущения играет интеграл перекрытия I , имеет вид $G^{-1} = G_0 - \Delta_0$, где $\Delta_0 = z|I|$, G_0 — локатор, определенный при $I = 0$. Суть используемого приближения состоит в том, что это уравнение применяется для функции Грина $\langle G \rangle$, усредненной по разбросу уровней, и среднего локатора $\sigma = \langle G_0 \rangle$: $\langle G \rangle^{-1} = \sigma^{-1} - \Delta_0$. Кроме того вводится эффективный интерэкортор $U \equiv \Delta_0 + \Delta_0^2 \langle G \rangle$, который в отличие от использованного выше потенциала V содержит слагаемое первого порядка по интегралу перекрытия I . Этому интерэкортору также отвечает уравнение Дайсона $U^{-1} = \Delta_0^{-1} - \sigma$. Двухчастичная гриновская функция [7–15]

$$\varphi(E; \mathbf{k}, z) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{k}' \mathbf{k}''} \langle G^R(\mathbf{k}'_+, \mathbf{k}''_+; E + z) G^A(\mathbf{k}'_-, \mathbf{k}''_-; E) \rangle \quad (41)$$

имеет в лестничном приближении вид [14]

$$\varphi(E; \mathbf{k}, z) = -\frac{1}{2\pi i} \left[\gamma^{-1} - \sum_{\mathbf{k}'} U^R(\mathbf{k}'_+, E + z) G^A(\mathbf{k}'_-, E) \right]^{-1}, \quad (42)$$

где $\mathbf{k}'_{\pm} = \mathbf{k}' \pm \mathbf{k}/2$, γ — неприводимая четыреххвостка, индексы R, A запаздывающей и опережающей функций отвечают выбору компонент $v = 0, 1$ из разных подпространств состояний системы. Отсюда, учитывая уравнение Дайсона и тождество Уорда [14]

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathbf{k}_+}^R(E + z) - \sigma_{\mathbf{k}_-}^A(E) &= \\ &= \gamma \sum_{\mathbf{k}'} [U^R(\mathbf{k}'_+, E + z) - U^A(\mathbf{k}'_-, E)] - \tilde{\gamma}z, \end{aligned} \quad (43)$$

где неприводимая вершина $\tilde{\gamma}$ имеет в отличие от γ два совпадающих хвоста, отвечающих одинаковым узлам, приходим к обычному выражению для двухчастичной функции Грина [7–15]

$$\varphi(\mathbf{k}, z) = -\frac{\chi(\mathbf{k})}{z + iD(\mathbf{k}, z)\mathbf{k}^2}, \quad (44)$$

где $\chi(\mathbf{k})$ — термодинамическая восприимчивость, равная в гидродинамическом пределе $\mathbf{k} = 0$ плотности состояния $g(E)$ на уровне E , $D(\mathbf{k}, z)$ — диспергирующий коэффициент диффузии, принимающий при $\mathbf{k} = 0$ значение [14]

$$D = \frac{1}{\pi g} \sum_{\mathbf{k}'} \left(\frac{k'}{m} \text{Im} \langle G_{\mathbf{k}'}^A \rangle \right)^2, \quad (45)$$

где k' — проекция \mathbf{k}' на \mathbf{k} , m — масса частицы.

3. Волновое представление Эдвардса

Поскольку в данном разделе за исходное (неупорядоченное) принимается однородное делокализованное состояние, то следует рассматривать величины, взятые в волновом представлении. Их набор сводится к оператору электронной плотности

$$\rho_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \rho_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{k}}, \quad \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'} \equiv \psi_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}/2}^+ \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}/2}^-, \quad (46)$$

продольной составляющей потока

$$j_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} j_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{k}'}, \quad j_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'} \equiv \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{km} \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'}, \quad (47)$$

и эффективной силе

$$f_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} f_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{k}'}, \quad f_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'} \equiv \sum_{\mathbf{k}''} \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}''} \left(\rho_{\mathbf{k}''}^{\mathbf{k}'+(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')/2} - \rho_{\mathbf{k}''}^{\mathbf{k}'-(\mathbf{k}-\mathbf{k}'')/2} \right), \quad (48)$$

выражения для которых получаются из уравнений непрерывности и движения. Здесь $\psi_{\mathbf{k}}^+$, $\psi_{\mathbf{k}}^-$ — операторы рождения и уничтожения электронов в состоянии $|\mathbf{k}\rangle$, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ — соответствующие уровни энергии, имеющие в согласии с моделью Андерсона [2] случайный характер. Гамильтониан Андерсона, записанный с учетом условия

$$\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} = N_0, \quad n_{\mathbf{k}} \equiv \langle \psi_{\mathbf{k}}^+ \psi_{\mathbf{k}}^- \rangle \quad (49)$$

сохранения числа электронов N_0 , имеет вид

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (I_{\mathbf{k}} - \mu) \psi_{\mathbf{k}}^+ \psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}^* \rho_{\mathbf{k}} \equiv H_0 + V, \quad (50)$$

где $I_{\mathbf{k}}$ — фурье-образ интеграла перекрытия узельных состояний электронов, μ — множитель Лагранжа, учитывающий условие (49). Очевидно

$$I_{\mathbf{k}} = (\mu - \varepsilon_F) + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}, \quad (51)$$

откуда следует $\mu = \varepsilon_F$, поскольку на больших расстояниях интеграл перекрытия стремится к нулю и, следовательно, $\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} I_{\mathbf{k}} = 0$.

Будем следовать схеме Гётце [16, 17], основанной на методе Цванцига–Мори [30]. В ее рамках основным объектом исследования является релаксационная функция

$$\varphi_{\mathbf{k}}(t) = \langle \langle \rho_{\mathbf{k}}(t) | \rho_{\mathbf{k}} \rangle \rangle \equiv \int_t^{+\infty} \langle [\rho_{\mathbf{k}}^+(t'), \rho_{\mathbf{k}}(0)] \rangle dt'. \quad (52)$$

Она связана с обычной восприимчивостью

$$\chi_{\mathbf{k}}(t) = i\theta(t) \langle [\rho_{\mathbf{k}}^+(t), \rho_{\mathbf{k}}(0)] \rangle \equiv -G_{\mathbf{k}}^R(t), \quad (53)$$

сводящейся к запаздывающей функции Грина $G_{\mathbf{k}}^R(t)$, где $\theta(t) = 1$ при $t > 0$ и $\theta(t) = 0$ при $t < 0$, следующим соотношением:

$$\varphi_{\mathbf{k}}(z) = z^{-1} [\chi_{\mathbf{k}}(z) - \chi_{\mathbf{k}}], \quad \chi_{\mathbf{k}} \equiv \chi_{\mathbf{k}}(i0). \quad (54)$$

Здесь и ниже временная $\varphi_{\mathbf{k}}(t)$ и частотная $\varphi_{\mathbf{k}}(z)$ зависимости связаны стандартным преобразованием Лапласа.

Переходя к непосредственному представлению процесса локализации, опишем сначала в нулевом приближении поведение свободных делокализованных электронов, для которых случайный потенциал $\varepsilon_{\mathbf{k}} = 0$. В рамках теории линейного отклика определение (52) приводит к результату [17, 31]

$$\varphi_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''(0)}(z) \equiv \langle \langle \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'}(z) | \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}''}(z) \rangle \rangle = -g_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''(0)} \left(z + \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{m} \right)^{-1}, \quad (55)$$

где статическая восприимчивость $g_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \equiv \langle \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'} | \rho_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}''} \rangle = \varphi_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}(t=0)$ дается в нулевом приближении выражением

$$g_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''(0)} = -\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{m} \right)^{-1} \left[n_0 \left(\mathbf{k}' + \frac{\mathbf{k}}{2} \right) - n_0 \left(\mathbf{k}' - \frac{\mathbf{k}}{2} \right) \right], \quad (56)$$

$n_0(\mathbf{k}) = \theta(\varepsilon_F - \mathbf{k}^2/2m)$ — ступенька Ферми. Введем безразмерные частоту $\zeta = z/\Delta_0$, волновое число $\kappa = k/k_D$ и энергию Ферми $E_F = \varepsilon_F/\Delta_0$, выраженные в единицах энергии $\Delta_0 \equiv k_D^2/2m$ и дебаевского волнового числа k_D . Тогда полная сжимаемость $g_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} g_{\mathbf{k}}^{\mathbf{k}'\mathbf{k}''}$ принимает канонический вид [31]

$$g_{\mathbf{k}}^{(0)} = g_F \chi \left(\frac{\zeta}{2E_F^{1/2}} \right), \quad \chi(x) \equiv \frac{1}{2} + \frac{1}{4x} (1-x^2) \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right|. \quad (57)$$

Суммирование зависимости (55) по $\mathbf{k}', \mathbf{k}''$ приводит к выражению типа (54) для нулевой функции релаксации $\varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(z)$, где роль динамической восприимчивости $\chi_{\mathbf{k}}(z)$ играет обобщенная сжимаемость

$$g_{\mathbf{k}}^{(0)}(z) = g_F \chi \left(\frac{\zeta}{2E_F^{1/2}}, \frac{\zeta}{4E_F} \right),$$

выражаемая функцией Линдхарда [31]:

$$\chi(x, y) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8x} \left\{ \left[1 - \left(x - \frac{y}{x} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{x+1-y/x}{x-1-y/x} \right| + \left[1 - \left(x + \frac{y}{x} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{x+1+y/x}{x-1+y/x} \right| \right\}. \quad (58)$$

Приведем используемый ниже длинноволновый предел выражения (58):

$$\chi(x, y) \approx -\frac{1}{3} \left(\frac{x}{y} \right)^2 \left[1 + \left(\frac{x}{y} \right)^2 \left(\frac{3}{5} + x^2 \right) \right], \\ x \equiv \frac{k}{2k_F} \ll 1, \quad y \equiv \frac{z}{4\varepsilon_F}. \quad (59)$$

Для выхода за нулевое приближение воспользуемся методом проекционных операторов Цванцига–Мори [30]. Согласно определению

$$P = |\rho\rangle \langle \rho| \rho^{-1} \langle \rho| \equiv 1 - Q, \quad (60)$$

где для краткости опущены аргументы \mathbf{k}, z , оператор P проецирует все величины в пространстве динамических переменных (46)–(48) на "ось" плотности заряда ρ , а дополнительный к нему оператор Q производит проецирование на подпространство, ортогональное этой оси. Уравнение движения

$$\dot{\rho}(t) = iL\rho(t), \quad (61)$$

записанное с помощью оператора Лиувилля L , позволяет на основе оси ρ генерировать пространство динамических величин: так, ось потока $j \propto \dot{\rho} \propto L\rho$ появляется в результате однократного действия оператора L , ось эффективной силы $f \propto \ddot{\rho} \propto L^2\rho$ — при двукратном действии и т.д.

Из (61) легко видеть, что лапласовский образ коррелятора (52) имеет вид

$$\varphi(z) = -\langle \rho | (z - L)^{-1} | \rho \rangle. \quad (62)$$

Отсюда, используя операторное тождество

$$\frac{1}{A+B} = \frac{1}{A} - \frac{1}{B} B \frac{1}{A+B}, \quad (63)$$

легко получить соотношения

$$\varphi(z) = -g [z + \Omega + K(z)]^{-1}, \quad g \equiv \langle \rho | \rho \rangle, \quad (64a)$$

$$\Omega = -\omega_0^2 \langle \rho | L | \rho \rangle \equiv \omega_0 \langle \rho | j \rangle, \quad \omega_0^2 g = 1, \quad (64b)$$

$$K(z) = -\langle j | Q(z - L_\rho)^{-1} Q | j \rangle, \quad j \equiv i\omega_0 \dot{\rho}, \quad L_\rho \equiv Q L Q. \quad (64b)$$

Первое из них представляет исходное звено цепочки Мори, остальные раскрывают микроскопический смысл ядер $\Omega, K(z)$. Проводя для последнего выкладки типа

указанных для исходного коррелятора (62), приходим к выражению второго звена цепочки:

$$K(z) = -\omega_0^2 [z + M(z)]^{-1}, \quad (65a)$$

$$M(z) = -\langle f | Q_j(z - L_j)^{-1} Q_j | f \rangle, \quad f = \omega_0^{-1} L_\rho j,$$

$$L_j = Q_j L_\rho Q_j, \quad Q_j = 1 - |j\rangle \langle j| j^{-1} \langle j|. \quad (65b)$$

В отличие от (64a) здесь отсутствует перекрестный коррелятор типа (64б), а функция памяти (65б) представляет коррелятор обобщенной силы f . Цепочку можно продолжить и дальше, и при этом в каждом ее звене коррелятор n -х производных от плотности заряда (46) по времени будет выражаться через коррелятор соответствующих производных порядка $n+1$. Такая структура обеспечивает ясность трактовки характера приближения, возникающего при обрыве цепочки Мори. Так, если следуя Гётце [16, 17] удержать только члены, выписанные в (64a), (65a), то удается представить эффекты памяти, играющие главную роль при описании потери эргодичности в процессе локализации электрона. При этом самосогласование схемы обеспечивается за счет выражения функции памяти $M(z)$ через исходный коррелятор $\varphi(z)$. Кроме того должны выполняться граничные условия [16]

$$\lim_{t \rightarrow 0} \varphi_{\mathbf{k}}(t) = \lim_{z \rightarrow \infty} [-z \varphi_{\mathbf{k}}(z)] = g_{\mathbf{k}}, \quad \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} g_{\mathbf{k}} = g_F; \quad (66)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} K_{\mathbf{k}}(t) = \lim_{z \rightarrow \infty} [-z K_{\mathbf{k}}(z)] = \chi_{\mathbf{k}}, \quad \lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \chi_{\mathbf{k}} = \frac{n}{m}, \quad (67)$$

где $g_{\mathbf{k}}$, $\chi_{\mathbf{k}}$ — сжимаемость и поляризуемость электронного газа⁵.

Теория Гётце [16, 17] представляет разновидность изложенного метода проецирования. При построении корреляционных функций типа (52) в качестве базисных удобно использовать не полную плотность $\rho_{\mathbf{k}}$, а ее составляющие $\rho_{\mathbf{k}}^{k'}$ (см. (46)). Тогда корреляторы типа $\varphi_{\mathbf{k}}^{k'k''}(z) = \langle \langle \varphi_{\mathbf{k}}^{k'}(z) | \rho_{\mathbf{k}}^{k''}(z) \rangle \rangle$ приобретают пару дополнительных индексов k' , k'' . Исходное уравнение (64a) удобно представить в виде

$$[z \hat{I}_{\mathbf{k}} + \hat{\Omega}_{\mathbf{k}} + \hat{K}_{\mathbf{k}}(z)] \hat{\varphi}_{\mathbf{k}}(z) = -\hat{g}_{\mathbf{k}}. \quad (68)$$

Здесь шляпка означает матрицу, элементы которой определяются верхними индексами (например, для $\hat{\varphi}_{\mathbf{k}}(z)$ — это $\varphi_{\mathbf{k}}^{k'k''}(z)$); \hat{I} — единичная матрица, $\hat{g}_{\mathbf{k}}$, $\hat{\Omega}_{\mathbf{k}}$, $\hat{K}_{\mathbf{k}}(z)$ определены соотношениями типа (64б), (64в). Для решения (68) представим входящие в него матрицы в базисе векторов $\alpha_{\mathbf{k}}^{k'\alpha}$, $\alpha = 0, 1, \dots$, ортонормированных по отношению к метрике $g_{\mathbf{k}}^{k'k''}$. В этом базисе величины $\rho_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}}^{1/2} A_{\mathbf{k}}^0$, $j_{\mathbf{k}} = (n/m)^{1/2} A_{\mathbf{k}}^1$, определенные равенствами (46), (47), выражаются через векторы

$$A_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \sum_{k'} \alpha_{\mathbf{k}}^{k'\alpha} \rho_{\mathbf{k}}^{k'}, \quad \alpha = 0, 1, \dots \quad (69)$$

Соответственно уравнение (68) принимает вид

$$(z \delta^{\alpha\beta} - \omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}) \varphi_{\mathbf{k}}^{\beta\gamma}(z) = -\delta^{\alpha\gamma} - m_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(z) \varphi_{\mathbf{k}}^{\beta\gamma}(z), \quad (70)$$

где по повторяющимся греческим индексам проводится суммирование, матричные элементы даются форму-

⁵ Не путать поляризуемость $\chi_{\mathbf{k}}$, представляющую статический предел коррелятора $K_{\mathbf{k}}(z)$ поляризаций $P_{\mathbf{k}} = \rho_{\mathbf{k}}$, с обобщенной восприимчивостью (53).

лами [17]

$$\omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}}^{k'\alpha} \alpha_{\mathbf{k}}^{k'\beta} (n_{\mathbf{k}'+\mathbf{k}/2} - n_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}/2}), \quad (71)$$

$$m_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(z) = \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \alpha_{\mathbf{k}}^{k'\alpha} \alpha_{\mathbf{k}}^{k''\beta} \langle f_{\mathbf{k}'} | (Q L Q - z)^{-1} | f_{\mathbf{k}''} \rangle. \quad (72)$$

Характерно, что матрица памяти (72) строится на векторах обобщенной силы

$$f_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \sum_{\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}}^{k'\alpha} f_{\mathbf{k}'}, \quad (73)$$

нулевая компонента которой $f_{\mathbf{k}}^{(0)} = 0$. Это следует как из определения (73) при подстановке в него компонент силы (48), так и из того факта, что в нулевом приближении на электрон не действует никакая сила. Благодаря данному свойству матрица $m_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(z)$ в двухкомпонентном базисе (69) имеет только одну ненулевую компоненту $m_{\mathbf{k}}^{11}(z) \equiv M_{\mathbf{k}}(z)$ типа (65б), представляющую коррелятор случайных сил

$$f_{\mathbf{k}} = (mn)^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}'} \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{k}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{k} \rho_{\mathbf{k}'} . \quad (74)$$

Принимая независимыми флуктуации величин $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, $\rho_{\mathbf{k}}$, находим выражение для массового оператора [17]

$$M_{\mathbf{k}}(z) = \frac{1}{mn} \sum_{\mathbf{k}'} \overline{|\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}|^2} \frac{(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{k}}{k} \varphi_{\mathbf{k}'}(z), \quad (75)$$

где черта означает усреднение по разбросу уровней. Равенство (75) представляет условие самосогласования, выражющее в рамках теории связанных мод [16] высший коррелятор $M_{\mathbf{k}}(z)$ через исходный $\varphi_{\mathbf{k}}(z)$. Линейный характер связи (75) обусловлен тем обстоятельством, что все базисные операторы (69) линейны по $\rho_{\mathbf{k}}^{k'}$.

С учетом указанного свойства матрицы $m_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(z)$ уравнение (70) для функции $\varphi_{\mathbf{k}}(z) = g_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}}^{00}(z)$ имеет решение [17]

$$\varphi_{\mathbf{k}}(z) = \varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(z + M_{\mathbf{k}}(z)) \left[1 + \frac{\varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(z + M_{\mathbf{k}}(z)) M_{\mathbf{k}}(z)}{g_{\mathbf{k}}^{(0)}} \right]^{-1}, \quad (76)$$

где нулевая функция $\varphi_{\mathbf{k}}^{(0)}(z)$ выражается соотношением (54) через восприимчивости (57), (58). Легко убедиться, что (76) можно представить в форме первых членов (64а), (65а) цепной дроби. В длинноволновом пределе, когда восприимчивость принимает вид (59), равенство (76) сводится к выражению

$$\varphi_{\mathbf{z}}(\zeta) = -g_F \chi \left(\frac{\chi}{2E_F^{1/2}} \right) [\zeta + iD_{\mathbf{z}}(\zeta) \chi^2]^{-1}. \quad (77)$$

Здесь введен диффузионный полюс, выраженный в единицах $\Delta_0/k_D^2 = (2m)^{-1}$:

$$D_{\mathbf{z}}(\zeta) \approx \frac{4}{3} i \frac{E_F}{\chi(\zeta/2E_F^{1/2})} [\zeta + M_{\mathbf{z}}(\zeta)]^{-1} \times \begin{aligned} & \times \left\{ 1 + \left(\frac{2\chi E_F^{1/2}}{\zeta} + M_{\mathbf{z}}(\zeta) \right)^2 \times \right. \\ & \times \left. \left[\frac{3}{5} + \frac{\chi^2}{4E_F} - \left(3\chi \left(\frac{\chi}{2E_F^{1/2}} \right) \right)^{-1} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (78)$$

где $M_\chi(\zeta)$ выражено в единицах Δ_0 . Из (78) в качестве предельного выражения $D_{\chi=0}(\zeta=0) \equiv 2mD$ следует обычный коэффициент диффузии

$$D = \frac{1}{3}v_F^2\tau, \quad \tau^{-1} \equiv \Delta_0 \operatorname{Im} M_{\chi=0}(\zeta=0), \quad (79)$$

связанный со статической проводимостью σ и подвижностью $\mu \equiv \sigma/n$ соотношением Эйнштейна $\sigma = g_F D$. Отсюда находим формулы Друде

$$\mu = \frac{\tau}{m}, \quad \sigma = \frac{n\tau}{m}. \quad (80)$$

Динамическая проводимость, определенная как коррелятор потоков (47), имеет вид

$$\sigma(z) = \frac{n}{m} D(z), \quad D(z) = -\frac{i}{z+M(z)}, \quad (81)$$

где $D(z) \equiv -i \lim_{k \rightarrow 0} (K_k(z)/k^2)$, $M(z) \equiv M_{k=0}(z)$. Отсюда следуют выражения для динамической поляризуемости $\chi(z) = (i/z)\sigma(z)$, диэлектрической проницаемости $\epsilon(z) = 1 + 4\pi\chi(z)$ и динамической подвижности $\mu(z) = \sigma(z)/n$.

В делокализованном состоянии реализуется режим проводимости, где $\mu \neq 0$. Следовательно, здесь имеем

$$\lim_{z \rightarrow 0} \sigma(z) = \sigma \neq 0; \quad \chi(z) = \frac{i\sigma}{z} \quad \text{при } z \rightarrow 0. \quad (82)$$

Соответственно в локализованном состоянии имеем изолятор с подвижностью $\mu = 0$ и поляризуемостью $\chi \neq 0$. Здесь

$$\lim_{z \rightarrow 0} \chi(z) = \chi \equiv \delta^{-2}, \quad \sigma(z) = -iz\chi \quad \text{при } z \rightarrow 0. \quad (83)$$

Согласно (82), (83) возникновение проводимости σ при делокализации приводит к статическому полюсу обобщенной поляризуемости $\chi(z)$ и параметру локализации $\delta = 0$, тогда как локализация характеризуется конечными значениями статической поляризуемости σ и параметра δ и линейным спаданием динамической проводимости $\sigma(z) \propto z$. Математически локализованное состояние удобно фиксировать не по указанным признакам (83), а по наличию полюса функции памяти:

$$\delta^2 = -z\sigma(z) \quad \text{при } z \rightarrow 0. \quad (84)$$

Согласно (84), (83) вычет этого полюса представляет микроскопический параметр локализации δ^2 , обратно пропорциональный статической поляризуемости χ .

Для формулировки схемы самосогласования, позволяющей определить параметр (84), примем дальнейшее упрощение модели. Именно, пренебрежем зависимостью функции памяти от волнового вектора: $M_k(z) \approx \approx M_{k=0}(z) \equiv M(z)$. Кроме того сведем зависимость $|\epsilon_k|^2$ к ступенчатой:

$$\overline{|\epsilon_k|^2} = W^2 \frac{6\pi^2}{k_D^3} \theta(k_D - k). \quad (85)$$

Согласно аппроксимации (85) случайные состояния электронов равномерно разбросаны по k -пространству в сфере радиусом k_D и по оси энергий в интервале шириной W . В результате условие самосогласования (75) принимает в безразмерных величинах $\zeta = z/\Delta_0$,

$\chi = k/k_D$, $E_F = \epsilon_F/\Delta_0$, $\lambda = (3/4)(W/\epsilon_F)^2$ вид

$$M(\zeta) = 4\lambda E_F \int_0^1 \varphi_\chi(\zeta) \chi^4 d\chi, \quad (86)$$

где $M(\zeta)$ выражено в единицах Δ_0 , а $\varphi_\chi(\zeta)$ в g_F/Δ_0 .

Система уравнений (76), (86) дает самосогласованное решение для подвижности μ в области проводимости и обратной поляризуемости $\chi^{-1} \equiv \delta^2$ в изоляторе. В первом случае, где можно принять $M(\zeta) \approx iv \equiv i/\tau\Delta_0$, имеем $\varphi_\chi^{(0)}(iv) = i\varphi_\chi^{(0)}(v)$, и (86) принимает вид

$$v = 4\lambda E_F \int_0^1 F(\chi, v) \chi^4 d\chi, \quad (87a)$$

$$F(\chi, v) \equiv -\varphi_\chi^{(0)}(v) \left[1 - \frac{v\varphi_\chi^{(0)}(v)}{\chi(v/2E_F^{1/2})} \right]^{-1}, \quad (87b)$$

где функция $\chi(x)$ задается равенством (57). В изоляторе, где важно поведение вблизи $\zeta = 0$, равенство (78) принимает вид $D_\chi(\zeta) \approx -(4/3)i(E_F/\delta^2)\chi^{-1}(x/2E_F^{1/2})\zeta$, и функция релаксации приобретает полюс $\varphi_\chi(\zeta) = -(\Delta_0/W)\Delta(\zeta)\zeta^{-1}$ при $\zeta \rightarrow 0$, где макроскопический параметр локализации $\Delta(\zeta)$ и связанный с ним микроскопический δ имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta(\zeta) = & 2\left(\frac{\lambda}{3}\right)^{1/2} E_F \chi \left(\frac{\chi}{2E_F^{1/2}} \right) \times \\ & \times \left[1 + \frac{4}{3} E_F \left(\frac{\chi}{\delta} \right)^2 \chi^{-1} \left(\frac{\chi}{2E_F^{1/2}} \right) \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (88a)$$

$$\delta^2 = 2(3\lambda)^{1/2} \int_0^1 \Delta(\zeta) \chi^4 d\chi. \quad (88b)$$

Пары равенств (87), (88) представляют трансцендентные уравнения для определения подвижности $\mu = (m\Delta_0 v)^{-1}$ носителей заряда в проводнике и статической поляризуемости $\chi = \delta^{-2}$ диэлектрика.

При произвольных значениях параметров λ , E_F уравнения (87), (88) решаются лишь численно. Характер получающихся зависимостей $\mu(W)$, $\delta(W)$ при разных величинах E_F представлен на рис. 3, 4. Аналитический вид достигается в предельном случае малых значений μ , δ , которые реализуются в переходной области, и в режимах слабой ($\lambda \ll 1$) и сильной ($\lambda \gg 1$) связи. Так, вблизи критического значения W_c , при котором $\mu = \delta = 0$, имеем с точностью до μ^2 , δ^4 включительно

$$\mu^2 B(\mu) \approx 1 - A, \quad (89)$$

$$C\delta^4 \approx (A-1)\delta^2, \quad (90)$$

где введены обозначения

$$A = 24\lambda E_F^{3/2} \int_0^\infty \chi^2(\zeta) \chi^2 d\zeta, \quad \alpha^{-1} \equiv 2E_F^{1/2}, \quad (91)$$

$$B = 384\lambda E_F^{7/2} \int_0^\infty \left[\frac{3}{5} + \chi^2 - \frac{1}{3}\chi^{-1}(\zeta) \right] \chi^2(\zeta) \chi^4 d\zeta, \quad (92)$$

$$C = \frac{9}{2} \lambda E_F^{-1/2} \int_0^\infty \chi^3(\zeta) d\zeta. \quad (93)$$

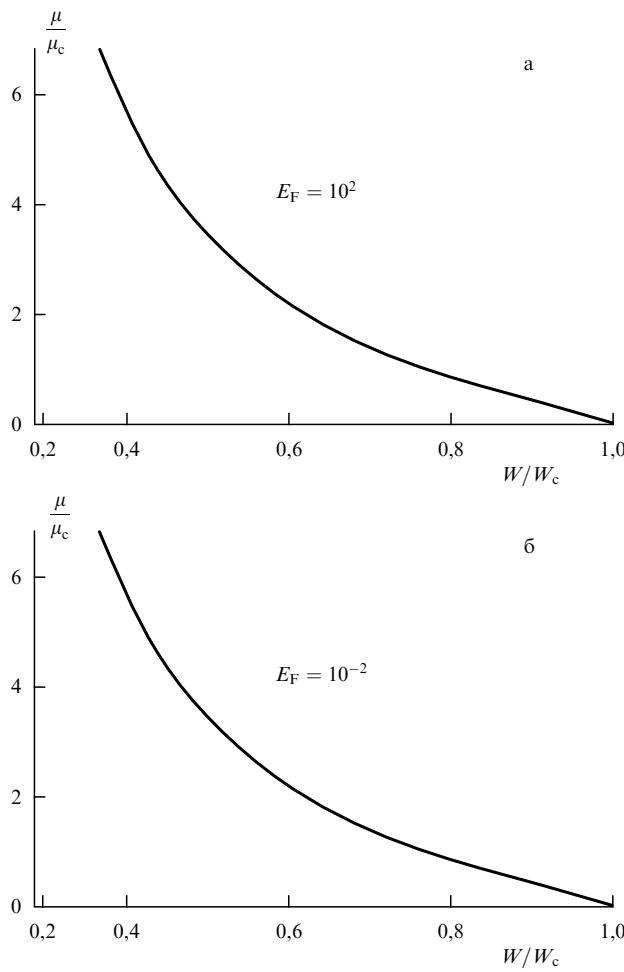


Рис. 3. Зависимость подвижности от ширины разброса уровней в проводнике для дальнодействующих (а) и короткодействующих (б) корреляций в разбросе уровней. Величины $\mu_c = \mu^{(0)}(W_c)$, W_c определены по формулам (101), (98) [17].

В пределах больших и малых значений E_F имеем

$$A \approx 6 \left(\frac{W}{\Delta_0} \right)^2 \begin{cases} \frac{1}{8} E_F^{-2} \left[1 - \frac{1}{10} E_F^{-1} \right], \\ 3E_F^{-1/2} \left[0,329 - \frac{2}{9} E_F^{1/2} \right], \end{cases} \quad (94)$$

$$B \approx \frac{12}{25} \left(\frac{W}{\Delta_0} \right)^2 \begin{cases} E_F^{-1} \left[1 + \frac{10}{21} E_F^{-1} \right], \\ \frac{80}{3} E_F \left[1 + 0,846 E_F^{1/2} \right], \end{cases} \quad (95)$$

$$C \approx \frac{27}{16} \left(\frac{W}{\Delta_0} \right)^2 \begin{cases} E_F^{-3} \left[1 - \frac{1}{12} E_F^{-1} \right], \\ 2E_F^{-5/2} \left[0,709 - \frac{32}{135} E_F^{5/2} \right], \end{cases} \quad (96)$$

где первая строка отвечает $E_F \gg 1$, вторая — $E_F \ll 1$.

Согласно (89), (90) линия перехода $W_c(E_F)$, разделяющая на фазовой плоскости $E_F - W$ делокализованное ($A < 1$) и локализованное ($A > 1$) состояния, определяется условием

$$A(W, E_F) = 1. \quad (97)$$

Подставляя сюда выражение (91), получаем фазовую диаграмму, показанную на рис. 5. Соответственно, используя (94), находим предельные аналитические выражения для критического разброса уровней (в единицах Δ_0)

$$\begin{aligned} W_c &\approx 1,15E_F (1 + 0,050E_F^{-1} + 0,004E_F^{-2}), \\ W_c &\approx 0,411E_F^{1/4} (1 + 0,338E_F^{1/2} + 0,171E_F). \end{aligned} \quad (98)$$

Здесь первая строка относится к большим значениям параметра $E_F \equiv \varepsilon_F/\Delta_0$, вторая — к малым. Согласно (98) линия перехода Андерсона вблизи точки $W = E_F = 0$ ведет себя в переменных W , k_F таким же (корневым) образом, как и при обычных фазовых превращениях.

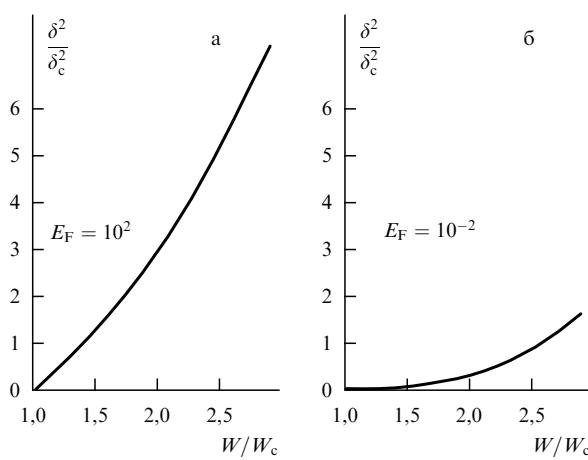


Рис. 4. Зависимость параметра локализации от ширины разброса уровней в изоляторе для дальнодействующих (а) и короткодействующих (б) корреляций в разбросе уровней. Величины $\delta_c^2 = \delta_0^2(W_c)$, W_c определены по формулам (102), (98) [11].

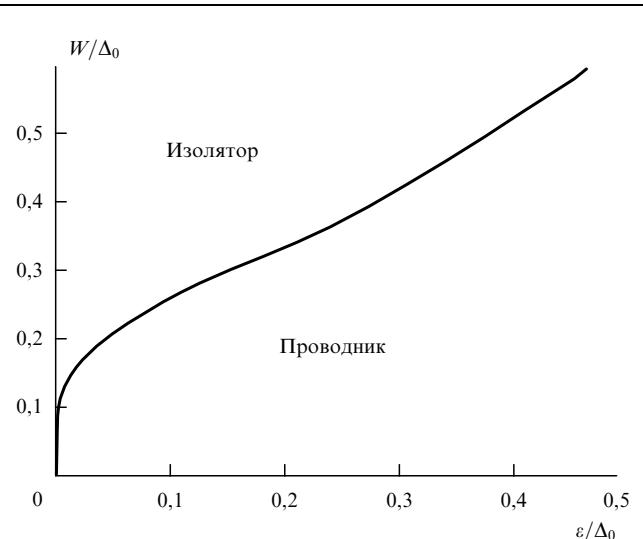


Рис. 5. Фазовая диаграмма перехода проводник–изолятор [17].

Выражения для подвижности μ и обратной поляризуемости δ^2 , вытекающие из (89), (90), вблизи линии $W_c(E_F)$ также имеют корневой вид:

$$(m\Delta_0)\mu \approx \left(\frac{2}{B_c}\right)^{1/2} \left(1 - \frac{W}{W_c}\right)^{1/2}, \quad (99)$$

$$\delta \approx \left(\frac{2}{C_c}\right)^{1/2} \left(\frac{W}{W_c} - 1\right)^{1/2}, \quad (100)$$

где значения параметров B, C взяты на критической линии.

В пределе слабой связи ($\lambda \ll 1$) решение уравнений (87) представляется членами $\mu^{(0)} \propto W^{-2}$, $\delta \propto W^0$ [17]:

$$\mu \approx \mu^{(0)} - \delta\mu,$$

$$(m\Delta_0)\mu^{(0)} = \frac{1}{3\pi} \left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^{-2} E_F^{-1/2} \max(1; 16E_F^2),$$

$$(m\Delta_0)\delta\mu \approx$$

$$\begin{aligned} &\approx \left\{ \frac{2}{3} E_F^{-1/2} \left\{ \frac{\pi}{2} \left[1 + \frac{1}{20} E_F^{-1} \right] - \frac{2}{\pi} \left[1 + \frac{1}{10} E_F^{-1} \right] \right\} \right\}, \\ &\approx \left\{ \frac{\pi}{2} E_F^{-1} \left\{ 0,458 - \frac{8}{3\pi^2} E_F^{1/2} \left[1 + \frac{8}{5} E_F \right] \right\} \right\}, \end{aligned} \quad (101)$$

где в выражении для $\delta\mu$ первая строка отвечает большим, вторая — малым E_F .

В обратном пределе $\lambda \gg 1$ разложение уравнений (88) по $(\delta/W)^2$ приводит к результату [17]

$$\begin{aligned} \delta^2 &\approx \delta_0^2 - \frac{4}{7} \left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^2 \delta_0^{-2}, \\ \delta_0^2 &\approx \frac{3}{5} \left(\frac{W}{\Delta_0}\right)^2 \left\{ E_F^{-1} \left[1 - \frac{5}{84} E_F^{-1} \right], \right. \\ &\quad \left. \left[1 + \frac{12}{5} E_F \right] \right\}. \end{aligned} \quad (102)$$

Обратимся теперь к рассмотрению динамики перехода Андерсона [16, 17]. Можно показать, что в трехмерном пространстве переменных W, ε_F, ω критическая область определяется условиями

$$\begin{aligned} (\varepsilon_F \Delta_0)^{1/2} &< |\omega + M(\omega)|, \\ \omega &< |M(\omega)|, \quad \omega M(\omega) < \varepsilon_F^2. \end{aligned} \quad (103)$$

Первое из них обеспечивает уменьшение динамической проводимости (81), второе — обратной поляризуемости (84) и, наконец, третье — гидродинамический режим, в котором только и следует ожидать проявления перехода Андерсона. В условиях (103) самосогласованная система уравнений (76), (86) сводится к равенству, обобщающему (89), (90):

$$A - BM^{-2}(\zeta) + C\zeta M(\zeta) = 1, \quad (104)$$

где использованы обозначения (90) — (93) и предельные выражения (77), (78). Введем величины

$$\Omega = \left(\frac{B}{C}\right)^{1/3}, \quad \varepsilon = \frac{(1-A)\Omega^2}{3B}, \quad (105)$$

принимающие вблизи линии перехода (97) вид

$$\varepsilon \approx \varepsilon_c \left(1 - \frac{W}{W_c}\right), \quad \varepsilon_c \equiv \frac{2\Omega_c^2}{3B_c}, \quad \Omega \approx \Omega_c \equiv \left(\frac{B_c}{C_c}\right)^{1/3}. \quad (106)$$

Таким образом, ε представляет собой удаление от линии превращения, Ω — характерную частоту. Решение уравнения (104)

$$M^{-1}(\zeta) = -\Omega^{-1} \begin{cases} |\varepsilon|^{1/2} F_{\pm}(|\varepsilon|^{-3/2} \zeta), & \varepsilon \neq 0; \\ F_0(\zeta), & \varepsilon = 0, \end{cases} \quad (107)$$

выражается через функции F_{\pm} , F_0 , представляющие корни уравнений

$$F_{\pm}^3 \mp 3F_{\pm} + \zeta = 0,$$

$$F_0^3 + \zeta = 0. \quad (108)$$

Вид частотной зависимости этих корней (рис. 6) определяется с учетом (107), (81) проводимость (в единицах $n/m\Delta_0$)

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) = \frac{M''(\omega)}{[\omega + M'(\omega)]^2 + [M''(\omega)]^2}, \quad (109)$$

где M' , M'' — действительная и мнимая части (107). Зависимость (109), представленная на рис. 7, показывает наличие максимума при частоте ω_m . Как видно из рис. 8, такой характер зависимости сохраняется и вне критической области (103). Частота ω_m максимума проводимости смещается с ростом разброса уровней W согласно графику, показанному на рис. 9. Здесь же приведены соответствующие зависимости термической щели $\Delta\varepsilon = \varepsilon_F - \varepsilon_c$, представляющей разницу между уровнем Ферми ε_F и граничной энергией ε_c (см. рис. 5), и

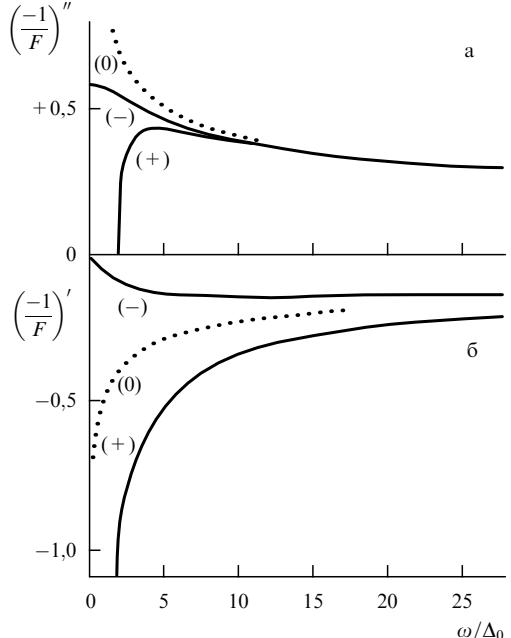


Рис. 6. Частотная зависимость мнимой (а) и действительной (б) частей для корней уравнений (108) [17].

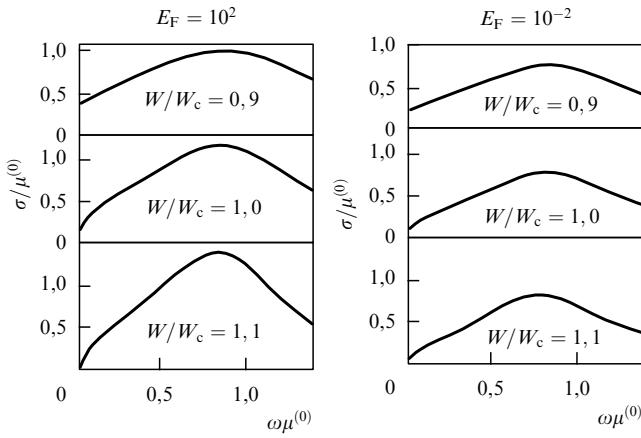


Рис. 7. Частотная зависимость проводимости при различных сочетаниях разброса уровней и типа их корреляции. Величины $\mu^{(0)}$, W_c задаются формулами (101), (98) [17].

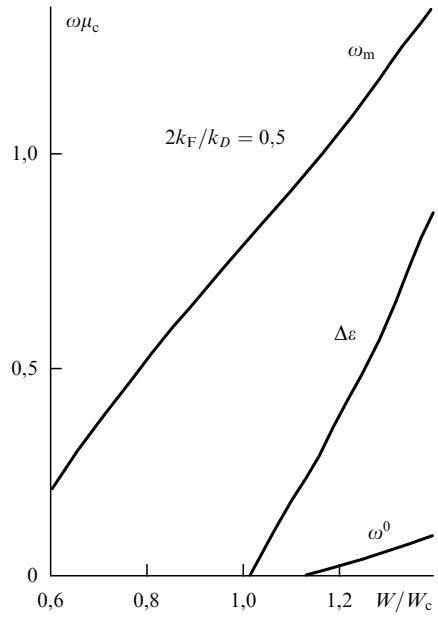


Рис. 9. Зависимость от ширины разброса уровней частоты ω_m максимума проводимости, термической щели $\Delta\epsilon = \epsilon_F - \epsilon_c$ между уровнем Ферми и граничной энергией ϵ_c появления проводимости (см. рис. 5), а также оптической щели ω^0 , начиная с которой появляется проводимость (см. рис. 8) [17].

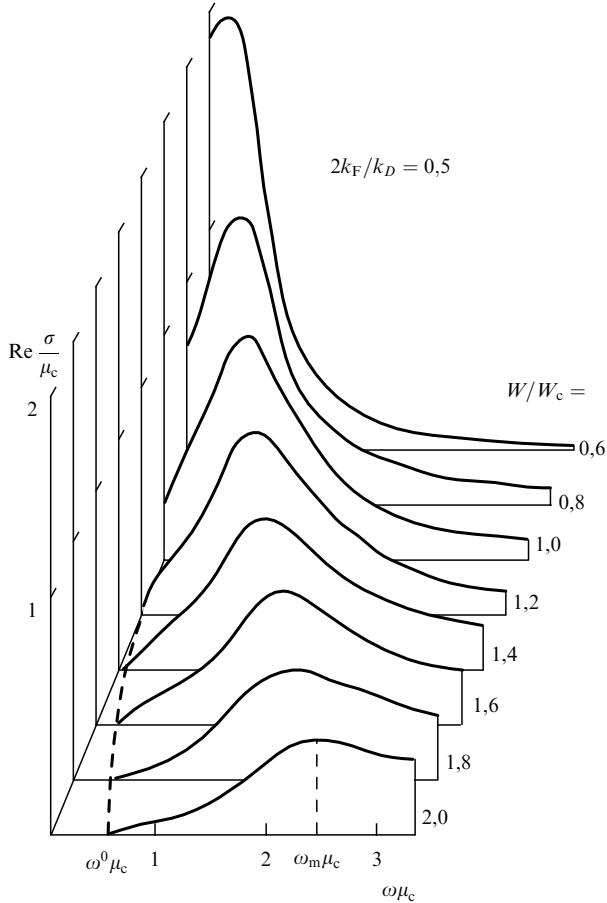


Рис. 8. Частотная зависимость действительной части проводимости при различных ширинах разброса уровней. Величины $\mu_c = \mu^{(0)}(W_c)$, W_c задаются формулами (101), (98) [17].

оптической щели ω^0 , начиная с которой появляется конечная проводимость. Характерно, что ненулевое значение ω_m , указывающее на отличие зависимости (109) от друлевской, появляется уже ниже точки перехода W_c . Это связано с поляризацией системы до

перехода в состояние изолятора. Напротив, величины $\Delta\epsilon(W)$, $\omega^0(W) \neq 0$ появляются лишь в самой точке перехода. Отметим, что наличие оптической щели ω^0 вообще является артефактом использованного метода, игнорирующего стремление к нулю предельного значения ($\varkappa \rightarrow \infty$) функции памяти $M_\zeta(\zeta)$ при ее замене значением $M(\zeta) \equiv M_{\zeta=0}(\zeta)$ [17].

Рассмотрим теперь характер пространственной дисперсии. С этой целью удобнее всего обратиться к длинноволновому пределу равенства (88а). Нетрудно видеть, что макроскопический параметр локализации подчиняется зависимости типа Орнштейна–Цернике:

$$\Delta_k = \frac{W}{\Delta_0} \xi^2 k^2 (1 + \xi^2 k^2)^{-1}, \quad (k_D \xi)^2 \equiv \frac{1}{3} \frac{2k_F}{k_D} \delta^{-2} \quad (110)$$

с длиной корреляции $\xi \propto \delta^{-1}$. Таким образом, чем больше микроскопический параметр локализации δ , тем меньше область ξ , в которой $\Delta(\mathbf{r})$ выходит на равновесное значение. Иными словами, с удалением от точки перехода $W = W_c$ размер области локализации носителей в изоляторе уменьшается согласно равенству

$$\xi \approx \xi_c \left(\frac{W}{W_c} - 1 \right)^{-1/2}, \quad (k_D \xi_c)^2 \equiv \frac{2}{3} \left(\frac{k_F}{k_D} \right)^2 C_c, \quad (111)$$

где учтено соотношение (100).

Везде выше имелся в виду трехмерный случай, для которого в зависимости от величин W , ζ оказываются возможными как делокализованное, так и локализованное состояния. В работе [12] диаграммными методами [29] исследовалось поведение вершинной части функции релаксации $\varphi_{\mathbf{k}}(z)$ для произвольной размерности d . Было показано, что при $d = 3$ рассмотрение сводится к изло-

женной самосогласованной схеме [17], тогда как для размерностей $d \leq 2$ при любых параметрах W , ε_F вершинная часть обладает статическим полюсом, указывающим на локализацию. На отсутствие делокализованного состояния в низкоразмерных системах указывает также ренормгрупповое исследование [6]. Однако это вовсе не означает, что в эксперименте они всегда будут представлять изоляторы. Действительно, хотя при разбросе $W \neq 0$ делокализованный кластер и является конечным, его размер может оказаться настолько большим, что он проявится как макроскопический.

Следует учитывать и другую сторону картины кластеризации, а именно, перколяционный характер перехода изолятор – проводник [32]. Такая задача рассматривалась на примере модели Лоренца, представляющей распространение частицы в поле рассеивающих центров [33]. В зависимости от их плотности N были найдены условия образования бесконечного кластера и локализации частицы в конечном. Оказалось, что с формальной точки зрения указанная задача, в принципе, не отличается от изложенной выше. Однако зависимость коэффициента диффузии частицы по бесконечному кластеру от разницы между плотностью рассеивателей N и ее критическим значением N_c , отвечающим порогу перколяции, имеет линейный вид $D \propto N_c - N$, а не корневой, как в (99).

Вместе с тем экспериментально наблюдались обе указанные зависимости, причем корневая сопровождалась магнитными аномалиями, наличие которых указывает на рассеяние, нарушающее симметрию относительно обращения времени [34]. В результате возникает задача модифицировать изложенную схему таким образом, чтобы в качестве предельных случаев получались корневая и линейная особенности, с одной стороны, и реализовывались симметричный и несимметричный режимы, с другой.

Согласно [35] для решения этой задачи следует провести процедуру самосогласования не на уровне функции памяти $M_k(z)$, а для неприводимой части $\Sigma_k(z)$, которая определяет $M_k(z)$ равенством типа (65а). Именно, игнорируя для простоты зависимость величин от волнового вектора, запишем вместо (86)

$$M(z) = \lambda\omega_0^2\varphi(z) - \delta^2[z + \Sigma(z)]^{-1}, \quad (112)$$

$$\Sigma(z) = \tau_1^{-1}[i + D_1\lambda_1\varphi(z)], \quad \tau_1 \equiv \left(\frac{\omega_0}{\delta}\right)^2 D_1^{-1}, \quad (113)$$

где λ, λ_1 — константы связи, ω_0 — характерная частота, τ_1, D_1 — время релаксации и коэффициент диффузии, не сводящиеся к ранее использованным τ, D (см. (79)). В гидродинамической области частот $|z|\tau_1 \ll 1$ коррелятор потоков (64в) принимает вид

$$K(z) = -\left\{ [\omega_0^{-2}z + \lambda\varphi(z)] + iD_1^{-1}[1 - iD_1\lambda_1\varphi(z)]^{-1} \right\}^{-1}. \quad (114)$$

Везде выше полагалось $D_1 = \infty$, и остающиеся члены (114) приводили на малых временах к четной асимптотике функции релаксации: $\varphi(t \rightarrow 0) \approx g_F[1 - (1/2)\omega_0^2t^2]$. Если же, напротив, положить $D_1 < \infty$, то уже в отсутствии обратной связи ($\lambda, \lambda_1 = 0$) получаем нечетную асимптотику $\varphi(t \rightarrow 0) \approx g_F(1 - D_1t)$. Таким образом, можно заключить, что обрыв цепочки (64), (65), (112), ...

на разных ступенях изменяет симметрию по отношению к обращению времени. Видно, что константа связи $\lambda \neq 0$ учитывает четные эффекты, не нарушающие этой симметрии, а $\lambda_1 \neq 0$ — нечетные, асимметричные. Исследуя всю область значений λ, λ_1 , можно надеяться на представление реальной ситуации.

Для количественного рассмотрения введем безразмерные величины $\zeta = z/D_1$, $\varphi(\zeta) = (D_1/g_F)\varphi(z)$, $K(\zeta) = K(z)/D_1$, $M(\zeta) = M(z)/D_1$ и константы связи

$$\varepsilon = 1 - \lambda g_F, \quad \eta = \lambda_1 g_F. \quad (115)$$

Тогда для области частот $|\zeta| < |M(\zeta)|$ в (114) можно опустить слагаемое $\omega_0^{-2}z$, и условие самосогласования, получающееся подстановкой (114) в (64), принимает вид [35]

$$[\zeta + \varepsilon K(\zeta)][\zeta + i\eta + K(\zeta)] = iK(\zeta)[\zeta + K(\zeta)]^2. \quad (116)$$

В проводнике реализуется предельное значение $-iK(\zeta = 0) \equiv K_+ > 0$. Поэтому можно записать $K_+(\zeta) = iK_+[1 + f_+(\zeta)]$, где

$$K_+ = \frac{1}{2}\left(\varepsilon + \sqrt{\varepsilon^2 + 4\varepsilon\eta}\right), \\ f_+(\zeta) = -iA^{-1}\zeta, \quad A \equiv \varepsilon(2K_+ - \varepsilon)\left[1 - \frac{\varepsilon(2K_+ - \varepsilon)}{K_+}\right]. \quad (117)$$

Отсюда видно, что проводящая фаза реализуется лишь при $\varepsilon > 0$, т.е. параметр ε имеет прежний смысл типа (106). От второго параметра η положение критической точки не зависит, однако его значение определяет характер зависимости $D(\varepsilon)$ коэффициента диффузии $D \equiv D_1 K_+$ от удаления ε от критической точки. Действительно, согласно (117) имеем корневую зависимость $D \approx D_1(\eta\varepsilon)^{1/2}$ в непосредственной близости к критической точке ($\varepsilon \ll 4\eta$) и линейную $D \approx D_1(\eta + \varepsilon)$ вдали от нее ($\varepsilon \gg 4\eta$).

Изолятор характеризуется асимптотикой $\lim_{\zeta \rightarrow 0}[\zeta^{-1}K(\zeta)] = K_- > 0$, с учетом которой запишем $K_-(\zeta) = K_-[\zeta[1 + f_-(\zeta)]$. Тогда из (116) следует

$$K_- = -\varepsilon^{-1}, \quad f_-(\zeta) = i\left[\frac{\zeta(1 - \varepsilon)}{\varepsilon}\right]^2 [\zeta(1 - \varepsilon) - i\eta\varepsilon]. \quad (118)$$

Соответственно поляризуемость $\chi(\zeta) = i\zeta^{-1}K_-(\zeta)$ принимает вид $\chi(\zeta) = iK_-[1 + f_-(\zeta)]$.

При анализе характера дисперсии следует кроме частоты мягкой моды ω_0 ввести три граничных значения: гидродинамический предел $\omega_e = D_1|\varepsilon|\sqrt{\varepsilon^2 + 4|\varepsilon|\eta}$ и критические частоты $\omega_c \approx D_1\eta^2$, $\omega_{ce} = D_1\eta\varepsilon$. В области больших значений $\omega \sim \omega_0$ величиной $K(z)$ в (64а) можно пренебречь, и спектральная плотность имеет предельный вид $\varphi''(\zeta) \propto \zeta^{-1}$. В проводящей фазе ($\varepsilon > 0$) проявляется лишь гидродинамическая граница, определяемая условием $|f_+(\zeta)| \ll 1$. В ее пределах ($\omega \ll \omega_e$) имеем постоянное значение $\varphi''(\omega) = g_F/D$. В изоляторе вид зависимости $f_-(\zeta)$ более сложен, и из (118) следуют предельные соотношения

$$K''(\omega) \approx D_1 \begin{cases} \left(\frac{\omega}{D_1\varepsilon}\right)^4 \eta^{-2}, & \omega \ll \omega_{ce}; \\ \left(\frac{\omega}{D_1\varepsilon}\right)^2 \varepsilon^{-1}, & \omega \gg \omega_{ce}, \end{cases} \quad (119)$$

область применимости которых ограничивается частотой $\omega_{ce} \propto \varepsilon\eta$. Согласно (119) нарушение симметрии по отношению к обращению времени приводит с ростом η к расширению области аномальной зависимости $K''(\omega) \propto \omega^4$. Здесь функция релаксации имеет вид

$$\varphi(\zeta) \approx -\frac{D_1}{W} q\zeta^{-1} - \varepsilon(1-\varepsilon)^{-2} f_-(\zeta)\zeta^{-1}, \quad \zeta \rightarrow 0. \quad (120)$$

Если первый полюс приводит к обычному δ -пику, характеризуемому параметром Эдвардса–Андерсона q , то второе слагаемое означает переход от псевдошумы к белому шуму:

$$\varphi''(\omega) \approx \frac{g_F}{D_1} \begin{cases} \left(\frac{\omega}{D_1\eta}\right)^2 |\varepsilon|^{-3}, & \omega \ll \omega_{ce}; \\ |\varepsilon|^{-1}, & \omega \gg \omega_{ce}. \end{cases} \quad (121)$$

Таким образом, в области $\omega \ll \omega_{ce}$ нарушение временной симметрии приводит к различной частотной зависимости $\varphi''(\omega)$ для проводника и изолятора. При обратимости времени ($\omega_{ce} \propto \eta = 0$) в обоих случаях имеем $\varphi''(\omega) = \text{const}$.

На линии перехода ($\varepsilon = 0$) уравнение (116) в предположении $\lim_{\zeta \rightarrow 0} [\zeta K^{-1}(\zeta)] = 0$ принимает вид

$$K^3(\zeta) - i\zeta K(\zeta) + \eta\zeta = 0. \quad (122)$$

Отсюда в предельных случаях, задаваемых частотой $\omega_c \propto \eta^2$, имеем

$$K''(\omega) \approx \frac{1}{2} D_1 \begin{cases} 3^{1/2} \left(\frac{\eta\omega}{D_1}\right)^{1/3}, & \omega \ll \omega_c; \\ 2^{1/2} \left(\frac{\omega}{D_1}\right)^{1/2}, & \omega \gg \omega_c. \end{cases} \quad (123)$$

Таким образом, спектральная плотность $\varphi''(\omega) \propto 1/K''(\omega)$ переходит от нормальной асимптотики $\varphi''(\omega) \propto \omega^{-1/2}$ в области $\omega \gg \omega_c$ к аномальной $\varphi''(\omega) \propto \omega^{-1/3}$ при $\omega \ll \omega_c$. Соответственно на временной оси получаем

$$\varphi(t) - \frac{q}{W} \propto \begin{cases} t^{-1/2}, & \eta^2 \ll \omega_c t \ll 1; \\ t^{-2/3}, & 1 \ll \omega_c t \ll \frac{\omega_c}{\omega_e}. \end{cases} \quad (124)$$

При $t \ll \omega_0^{-1}$ имеем $\varphi(t) \approx g_F [1 - (1/2)\omega_0^2 t_0^2]$, в обратном предельном случае $t \gg \omega_e^{-1}$ — дебаевское спадание $\varphi(t) \propto \exp(-\omega_e t)$. Посредине расположена область применимости асимптотик (124).

4. Заключение

Основная идея обзора состоит в том, чтобы продемонстрировать взаимную дополнительность узельного и волнового подходов к проблеме локализации квантовой частицы в случайном потенциале. При этом одночастичные свойства наиболее естественным образом представляются в рамках узельного подхода, а коллективные — в волновом представлении. Физическая причина такой ситуации заключается в том, что в первом случае роль исходного (неупорядоченного) состояния играет локализованное, а во втором — делокализованное состояния.

Как видно из раздела 2, теоретическая схема узельного приближения основывается на двух основных по-

сылках. Во-первых, следует учесть, что перекрытие узельных волновых функций приводит к расщеплению конфигурационного пространства на составляющие одиночных и многоузельных состояний. Благодаря этому гамильтониан Андерсона (5) трансформируется в выражение (8), которое отличается от гамильтониана БКШ в теории сверхпроводимости только тем, что вместо импульсного представления фигурирует узельное и эффективный потенциал межчастичного взаимодействия зависит от энергетического спектра системы. Другим принципиальным положением нашего подхода [18, 19] является идея представить закаленный беспорядок в распределении холодной переменной ε распределением (19), сводящимся к гиббсовскому. Иными словами, предполагается сильно неравновесную статистическую неупорядоченность представить как замороженные термодинамические флуктуации, характеризуемые "температурой" $W/2$.

На первый взгляд, наиболее уязвимо второе из указанных предположений, поскольку распределение Гиббса описывает равновесные статистические ансамбли, а модель Андерсона представляет сильно неравновесную систему. По поводу этого возражения можно было бы просто отмолчаться, как, по сути дела, и поступил Андерсон [2], приняв *a priori* ступенчатую аппроксимацию $P(\varepsilon)$. Рассуждая в таком духе, наше распределение (19) можно рассматривать как одну из возможных аппроксимаций в ряду моделей Андерсона, Ллойда и т.д. Есть, однако, веские основания предпочтеть экспоненциальное распределение всем остальным, и состоят они не только в том, что с таким распределением привычнее работать, а в принципиальной сути вещей. Действительно, в последнее время показано (см., например, [36]), что форма распределения Гиббса присуща не только равновесным статистическим ансамблям, но и системам, значительно удаленным от равновесия. Основными требованиями, позволяющими сохранить экспоненциальную форму статистического распределения, являются условие стационарности неравновесной системы⁶ и ее эргодичность. При выполнении этих условий статистическое распределение неравновесной системы будет иметь вид распределения Гиббса, где роль энергии играет синергетический потенциал, а температура сводится к интенсивности шума, определяющей степень закаленного беспорядка [36]. Как видно из раздела 2, именно такой смысл вкладывается в используемое нами распределение (19). Что касается условий стационарности и эргодичности, то первое из них обеспечивается подразумеваемой в модели Андерсона бесконечно быстрой закалкой системы до нулевой температуры. Казалось бы, совершенно не выполняется условие эргодичности, поскольку локализация электронов представляет не что иное, как нарушение эргодичности в смысле перемещения в прямом пространстве. Однако в отличие от иерархически соподчиненных систем типа спиновых стекол при этом фазовое пространство не разбивается на бесконечное множество изолированных макрообластей. Точнее говоря, при локализации от конфигурационного пространства, отвечающего делокализованному состоянию, отщепляются изолированные

⁶ Например, стационарна жидкость, текущая с постоянной скоростью.

области микроскопического масштаба (в \mathbf{r} -пространстве он ограничивается межатомным). Поскольку эти области не отличаются друг от друга, то их можно объединить в макрообласть фазового пространства, отвечающую локализованной фазе, а оставшаяся часть этого пространства определяет поведение делокализованной фазы. В результате разделение фазового пространства, обусловленное локализацией, представляется так же, как и при обычных фазовых переходах. Именно это обстоятельство позволило представить нам процесс делокализации согласно стандартной схеме фазовых переходов.

Как уже указывалось, в рамках нашего подхода параметр порядка определяет долю делокализованных электронов, а сопряженное ему поле — смещение из центра зоны; роль параметра состояния типа температуры играет ширина разброса уровней. Существенное отличие схемы делокализации, представленной в разделе 2, от стандартного варианта микроскопической теории фазовых переходов обусловлено отмеченным выше разделением конфигурационного пространства системы на области локализованных и делокализованных состояний. Оказалось, что эффективный потенциал взаимодействия зависит от характера этого разделения и, таким образом, от внешних условий. Это выражалось в появлении логарифмического множителя для зависимости "термодинамического" потенциала от параметра порядка, в результате чего степень фазового перехода изменилась от 2 до $2 + \delta$, $\delta \rightarrow 0$.

Следует иметь в виду, что это обстоятельство не исчерпывает перечень всех причин, приводящих к отличию картины перехода Андерсона от теории среднего поля для обычных фазовых превращений. Согласно [37] в рамках этого приближения подразумевается, что новая фаза зарождается в областях одинаковой формы и размера. Иными словами, принимается однородное распределение флуктуаций в пространстве. Если учесть отклонение от него, и в особенности фрактальный характер флуктуаций, присущий критической области, то оказывается, что значения всех критических показателей размыкаются в пределах некоторых ограниченных интервалов [37]. Например, показатель β , фигурирующий в соотношении $\eta \propto (W_c/W - 1)^\beta$, подчиняется условиям $1/3 \leq \beta \leq 1/2$. Характерно, что фрактальная структура характеризуется не единственным значением β из этого интервала, а некоторым распределением по всей его длине.

Касаясь особенностей волнового приближения, изложенного в разделе 3, следует прежде всего обратить внимание на его изначальное отличие от узельного подхода — если последний позволяет найти только стационарное значение величин (см. раздел 2), то основной задачей волнового приближения является определение гидродинамических выражений для характерных корреляторов в зависимости от комплексной частоты и волнового вектора. Поэтому наиболее подходящим математическим инструментом в решении такой задачи представляется цепная дробь Цванцига–Мори, позволяющая выразить основные корреляторы типа "плотность – плотность" через высшие корреляционные функции. С физической точки зрения такая дробь удобна благодаря тому обстоятельству, что каждая из этих функций имеет прозрачный физический смысл. В результате легко поддается пониманию характер приближения, возникающего при обрыве цепной дроби.

Для построения самосогласованной схемы использовался метод связанных мод, позволяющий выразить высший коррелятор через исходный. В простейшем варианте теории локализации, построенной Гётзе [17], оказывается, что эффекты потери эргодичности схватываются уже функцией памяти, представляющей ядро второго звена цепочки Мори. В силу отсутствия прямого межэлектронного взаимодействия Гётзе положил, что функция памяти пропорциональна первой степени исходного коррелятора (52). Таким образом, метод связанных мод, само название которого отражает наличие высших степеней в такого рода аппроксимациях, в действительности свелся к рассмотрению мод несвязанных. В результате, несмотря на самосогласованный характер задачи, в схеме [17] отсутствует нелинейная обратная связь. Поскольку согласно синергетической идеологии [38] именно положительная обратная связь является причиной самоорганизации, возникло опасение, что схема [17] не содержит фазовый переход. В этой связи мои сотрудники И.В. Коплык и А.А. Колесков предприняли проверку численного решения уравнений самосогласования (87), представляющих основу схемы Гётзе [17]. К нашему удивлению, оказалось, что при всех значениях W подвижность $\mu \propto v^{-1}$ отлична от нуля и, таким образом, эти уравнения не дают перехода Андерсона, хотя зависимость $\mu(W)$, приведенная на рис. 3, хорошо воспроизводится вдали от критической точки W_c . Учитывая, что в работах Гётзе какое-либо упоминание по этому поводу отсутствует, мы вынуждены были прийти к заключению о непоследовательности схемы самосогласования [17]. Кроме обстоятельства, указанного в связи с уравнениями (87), это проявляется также в условии (89), задающем фазовую диаграмму системы — при его выводе используется длинноволновая аппроксимация (77), в которой полагается $\zeta = 0$, тогда как в последующем выражении (78) для коэффициента диффузии в первом сомножителе принимается $\zeta = 0$, а во втором — $\zeta = \infty$. Таким образом, теория [17] представляет аппроксимационную схему, в рамках которой наличие перехода Андерсона обеспечивается лишь за счет искусственного отбора слагаемых в уравнении самосогласования.

Отметим в заключение некоторые проблемы и перспективы развития излагаемых подходов. Прежде всего бросается в глаза то обстоятельство, что, хотя везде рассматривался электрон в случайном поле, многие результаты (типа порога подвижности и плотности состояний) в силу одночастичного характера задачи не должны быть чувствительны к типу статистики квантовой частицы. Ответ на вопрос: "Так ли это?" пока остается открытым.

Обращает также на себя внимание абсолютно автономное изложение материала для каждого из подходов в разделах 2, 3. В этой связи возникает естественное желание объединить эти подходы. Недавно нам удалось реализовать эту программу [39] на основе локаторного представления, в рамках которого одночастичные свойства системы описываются гривовской функцией фермионов, взятой в узельном представлении. Эта функция подчиняется уравнению Дайсона, в котором собственно энергетическая функция выражается через вершинную функцию эффективного взаимодействия фермионов. Данная функция представляет коллективные возбуждения системы и подчиняется уравнению Бете–Солпитера,

замыкающему самосогласованное описание обоих типов возбуждений. В рамках такого подхода взаимная дополнительность узельно-временного и частотно-волнового подходов проявляется в том, что уравнение Дайсона наиболее простым образом представляется в рамках первого из них, а уравнение Бете–Солитера — вторым. Эта особенность не представляется неожиданной, если вспомнить, что узельное приближение в разделе 2 позволило описать, в основном, одиночественные свойства, а волновое в разделе 3 — коллективные.

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить В.Г. Барьятара за поддержку работы. Многим в этой работе я обязан И.В. Коплыку, А.А. Колоскову и В.А. Бражному.

Список литературы

1. Belitz D, Kirkpatrick T R *Rev. Mod. Phys.* **66** 261 (1994)
2. Anderson P W *Phys. Rev.* **109** 1492 (1958)
3. Edwards S F *Phil. Mag.* **3** 1020 (1958)
4. Wegner F J *Z. Phys. B* **35** 207 (1979)
5. Thouless D J *Phys. Rev. Lett.* **39** 1167 (1977)
6. Abrahams E et al. *Phys. Rev. Lett.* **42** 673 (1979)
7. Ефетов К Б, Ларкин А И, Хмельницкий Д Е *ЖЭТФ* **79** 1120 (1980)
8. Schäfer L, Wegner F Z. *Phys. B* **38** 113 (1980)
9. Ефетов К Б *ЖЭТФ* **82** 872 (1982)
10. Efetov K B *Adv. Phys.* **32** 53 (1983)
11. Горьков Л П, Ларкин А И, Хмельницкий Д Е *Письма в ЖЭТФ* **30** 248 (1979)
12. Vollhardt D, Wölfle P *Phys. Rev. B* **22** 4666 (1980)
13. Kotov E A, Sadovskii M V Z. *Phys. B* **51** 17 (1983)
14. Kopf T J. *Phys. C* **17** 1897 (1984)
15. Altshuler B L et al. *Quantum Theory of Solids* (Eds I M Lifshits) (Moscow: Mir, 1982) p. 130
16. Гётце В *Фазовые переходы жидкость – стекло* (М.: Наука, 1992)
17. Götze W *Phil. Mag. B* **43** 219 (1981)
18. Олемской А И *ФТТ* **23** 3442 (1981)
19. Olemskoi A I *Phys. Stat. Solidi (b)* **160** 569 (1990)
20. Шриффер Дж *Теория сверхпроводимости* (М.: Наука, 1970)
21. Марч Н, Янг У, Сампантхар С *Проблема многих тел в квантовой механике* (М.: Наука, 1969)
22. Higgs P W *Phys. Rev. Lett.* **13** 508 (1964)
23. Гинзбург С Л *Не обратимые явления в спиновых стеклах* (М.: Наука, 1989)
24. Боголюбов Н Н, в сб. *Статистическая физика и квантовая теория поля* (М.: Наука, 1973) с. 7
25. Aharony A, Imry Y *J. Phys. C* **10** L487 (1977)
26. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика. Ч. 1* (М.: Наука, 1976)
27. Licciardello D C, Economou E N *Phys. Rev. B* **11** 3697 (1975)
28. *Справочник по специальным функциям* (Под ред. М Абрамовича, И Стигана) (М.: Наука, 1979)
29. Абрикосов А А, Горьков Л П, Дзялошинский И Е *Методы квантовой теории поля в статистической физике* (М.: Физматгиз, 1962)
30. Zwanzig R J. *Chem. Phys.* **33** 1338 (1960); *Phys. Rev.* **124** 983 (1961); Mori H *Progr. Theor. Phys.* **33** 423 (1965)
31. Пайис Д, Нозье Ф *Теория квантовых жидкостей* (М.: Мир, 1967)
32. Шкловский Б И, Эфрос А Л *Электронные свойства легированных полупроводников* (М.: Наука, 1979)
33. Götze W, Leutheusser E, Yip S *Phys. Rev. A* **23** 2634 (1981)
34. Anderson P W, in *Localization, Interaction and Transport Phenomena* (Eds B Kramer, G Bergmann, Y Bruynserade) (Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 1985)
35. Götze W, Narcisi C Z. *Phys. B* **78** 21 (1990)
36. Хорстхемке В, Лефевр Р *Индукционные шумом переходы* (М.: Мир, 1987)
37. Олемской А И, Флат А Я *УФН* **163** (12) 1 (1993)
38. Хакен Г *Синергетика* (М.: Мир, 1980)
39. Олемской А И, Коплык И В, Колосков А А *ФТТ* **37** 1198 (1995)

Self-consistent theory of site localisation, and wave approaches

A.I. Olemskoi

Sumy State University 2, Rimskii-Korsakov Str., Ukraine, Sumy 244007
Tel. (7-0542) 33-3465
E-mail: sgu@sgu.ts.kiev.ua

The mutual complementarity of the Anderson site representations and the Edwards wave approach is considered within the framework of the quantum statistical theory. The former is used for the description of one-particle excitations. Based on the permutational symmetry analysis of the wave function, it is shown that the symmetry of the Anderson Hamiltonian exceeds that of the space of states. Transition to an extended state is represented within the framework of the quasi-averages theory as a phase transition of order $2 + \delta$, where $\delta \rightarrow 0$ is an addition caused by the appearance of a logarithm. A study of the collective mode is possible within the framework of the Edwards wave representation. The examination is reduced to determining the charge distribution autocorrelation function which is expressed in terms of higher correlators of current density and generalised force, using the Mori technique. Dependences of the conductivity and polarizability on the level scatter width and Fermi energy are determined. The form of the frequency dependence of the conductivity as well as the spatial dispersion pattern are analyzed.

PACS numbers: 73.20.Jc, 71.25.-s, 67.40.Db

Bibliography — 39 references

Received 27 February 1996