

О ПЕРЕХОДЕ МЕТАЛЛ – ИЗОЛЯТОР ПО ПАРАМЕТРУ АНИЗОТРОПИИ В СЛУЧАЕ СЛАБОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТИ

О.Н.Дорохов

С помощью численных расчетов в модели со слабым примесным потенциалом ($k_F l \gg 1$) обнаружена точка перехода металл – изолятор при увеличении степени квазиодномерности.

При нулевой температуре в одномерном (1D) случае электрон локализуется сколь угодно слабым случайным потенциалом, если можно пренебречь межэлектронным взаимодействием. В связи с этим возникает важный вопрос, не разрушится ли слабая 1D локализация ($k_F l \gg 1$) при учете малой вероятности t_{\perp} для перескока электрона с одной цепочки на другую в данном квазиодномерном (Q1D) соединении. Всякий раз, когда результат, связанный с 1D локализацией, применяется для описания реального физического явления, на самом деле неявно предполагается устойчивость феномена слабой 1D локализации к включению малого t_{\perp} . С другой стороны, если анизотропия ($t_{\parallel} / t_{\perp}$) не велика, то условие $k_F l \gg 1$ отвечает металлической фазе. Таким образом, если указанное предположение верно, то должна существовать точка $(t_{\perp})_c \ll t_{\parallel}$, где происходит переход металл – изолятор. В работе ¹ этот переход исследовался с помощью так называемого самосогласованного подхода ² к теории локализации, и было получено значение $2(t_{\perp})_c = 0,31 / \tau$, где $\tau = l / v_F$ – это кинетическое время свободного пробега. Хотя оценка $(t_{\perp})_c \sim 1 / \tau$ кажется правдоподобной ³, сам вывод о существовании перехода при конечном t_{\perp} по-видимому нельзя считать доказанным, поскольку использованный в ¹ метод ² основан на допущениях, справедливость которых остается под вопросом (в ² суммируется некое подмножество всей совокупности диаграмм, причем отброшенные члены имеют тот же порядок величины, что и оставленные).

Мы представляем здесь результаты численных расчетов, которые недвусмысленно свидетельствуют в пользу перехода при

$$(t_{\perp})_c = 0,08 / \tau \quad (1)$$

в условиях, когда $(t_{\perp})_c \ll t_{\parallel}$.

Рассматривалась стандартная модель неупорядоченного Q1D металла ($t_{\parallel} = 1, t_{\perp} \ll 1$) на простой кубической решетке:

$$(\epsilon - U_{n, n_z}) \psi_{n, n_z} = \psi_{n, n_z - 1} + \psi_{n, n_z + 1} + t_{\perp} \sum_a \psi_{n+a, n_z} \quad (2)$$

где $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$; n_x, n_y, n_z – целые числа; $\mathbf{n} + \mathbf{a}$ отвечает четырем ближайшим соседям вектора \mathbf{n} ; случайный потенциал U задается независимо на каждом узле с помощью функции распределения $P(U) = 1/W$ при $|U| < W/2$ и $P(U) = 0$ при $|U| > W/2$. Мы зафиксировали энергию в центре зоны ($\epsilon = 0$) и ограничились двумя значениями беспорядка $W = 3,5$ и $W = 3,5 / \sqrt{2}$. В обоих случаях неупорядоченность следует считать слабой, поскольку характерный масштаб, на котором разыгрывается 1D локализация $\psi(z) \sim \exp(-|z|/\xi_{1D})$, велик и равен $\xi_{1D} = 105 / W^2$.

Пичард и Сарма ⁴ определили численно точку андерсоновского перехода в изотропном случае ($t_{\perp} = 1$) по параметру W – их результат $W_c = 19$. Использованный в ⁴ метод состоит в том, что вначале вычисляется длина локализации ξ в длинной проволоке с поперечным сечением $N \times N$, а затем о 3D локализации судят по характеру зависимости $\xi(N)$. Тем же методом мы исследовали переход по параметру анизотропии t_{\perp} в условиях слабой неупорядоченности. Ответ (1) означает, что в плоскости (W, t_{\perp}) имеется линия раздела металлической и диэлектрической фаз, уравнение которой при $t_{\perp} \ll 1$ имеет вид $t_{\perp} (3,5/W)^2 = 0,08$.

Длина локализации $\xi(N)$ вычислялась для образцов в форме длинного бруска ($L \gg \gg 3 \cdot 10^4$) с сечением $N \times N$. Результаты приведены на рис. 1, где на кривых отмечены значения параметра $A = 50t_{\perp} (3,5/W)^2$, а крестики и квадратики обозначают $W = 3,5$ и $W = 3,5/\sqrt{2}$ соответственно. Бросается в глаза выделенная роль проходящей через начало координат прямой, которой отвечает $A_c = 4$. Область $A \geq A_c$, где при $N \rightarrow \infty$ длина локализации остается больше поперечного размера, следует отождествить с металлической фазой. Наоборот, при $A < A_c$ в пределе $N \gg 1$ отношение $\xi(N)/N$ стремится к нулю, что характерно для диэлектрической фазы. Естественно предположить, что при $A < A_c$ кривые $\xi_A(N)$ выходят на асимптотические значения $\xi_A(\infty)$, однако точность наших расчетов недостаточна для определения индекса в зависимости $\xi_A(\infty) \sim (A_c - A)^{\nu}$.

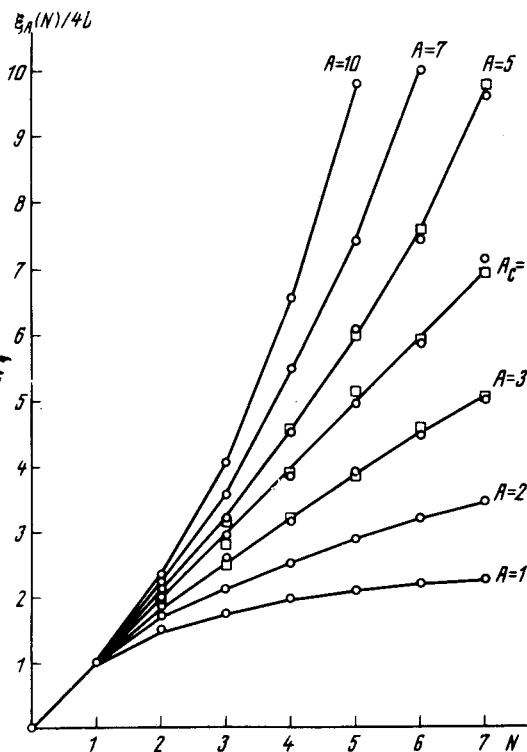


Рис. 1

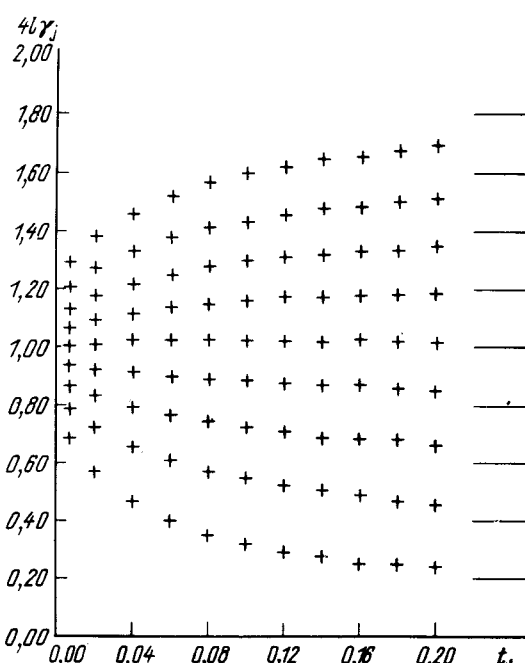


Рис. 2

Опишем вкратце как вычисляется $\xi(N)$. Для $2N^2$ -компонентного вектора $\Phi(L) = \begin{bmatrix} \psi_{n, L+1} \\ \psi_{n, L} \end{bmatrix}$ из (2) следует рекуррентное соотношение $\Phi(L) = m(L)\Phi(L-1)$, где случайная симплектическая матрица $m(L)$ имеет вид

$$m(L) = \begin{bmatrix} H(L) & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (3)$$

$$H_{n, n'}(L) = (\epsilon - U_{n, L})\delta_{n, n'} - t_{\perp} \sum_a \delta_{n+a, n'}. \quad (4)$$

Таким образом находим

$$\Phi(L) = M(L)\Phi(0), \quad (5)$$

$$M(L) = \prod_{i=1}^L m(i). \quad (6)$$

Локализация волновой функции очевидным образом связана со скоростью нарастания или убывания $\Phi(L)$ при увеличении L , а изменение $\Phi(L)$ определяется поведением собственных значений симплектической матрицы (6). У такой матрицы половина собственных значений

$\lambda_j (j = 1, \dots, N^2)$ экспоненциально нарастают $\lambda_j = \exp(\gamma_j L)$, а остальные – убывают $\lambda_{N^2+j} = 1/\lambda_j = \exp(-\gamma_j L)$. Показатели Ляпунова $0 < \gamma_1 < \dots < \gamma_{N^2}$ являются самосредневаемыми при $L \rightarrow \infty$ величинами. Вектор $\Phi(0)$ можно разложить по системе собственных векторов матрицы (6), каждый из которых убывает или нарастает по своей собственной экспоненциальной зависимости. Так возникает иерархия масштабов $\xi_j = 1/\gamma_j$, на что обращалось внимание в работах ^{5,3}. Особую роль играет максимальный масштаб $\xi_1 = 1/\gamma_1$, который следует отождествить с длиной локализации $\xi(N)$.

Типичная зависимость ляпуновских показателей γ_j от t_{\perp} показана на рис. 2 (взяты параметры $N=3, W=3,5$). При $t_{\perp} = 0$ (1D случай) имеется вырождение уровней: $\gamma_j = 1/4l$, которое снимается, когда $t_{\perp} \neq 0$. Среднее от положительных показателей Ляпунова выражается при данном t_{\perp} через соответствующую длину свободного пробега:

$$\langle \gamma \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_1^{N^2} \gamma_j = (4l)^{-1}. \quad (7)$$

На рис. 2 справа отмечены асимптотические значения показателей Ляпунова

$$\gamma_j((t_{\perp})_c \ll t_{\perp} \ll t_{\parallel}) = \langle \gamma \rangle \frac{2j}{N^2 + 1}. \quad (8)$$

Формулы (7), (8) были получены в работах ^{5,3}.

Автор благодарен Л.П.Горькову за полезные обсуждения на всех стадиях работы, и А.И.Ларкину за интерес к результатам.

Литература

1. Пригодин В.Н., Фирсов Ю.А. Письма в ЖЭТФ, 1983, **38**, 241.
2. Vollhardt D., Wölfle P. Phys. Rev., 1980, **B22**, 248.
3. Dorokhov O.N. Solid State Comm., 1984, **51**, 381.
4. Pichard J.L., Sarma G. J. Phys., 1981, **C14**, L127.
5. Дорохов О.Н. Письма в ЖЭТФ, 1982, **36**, 259; ЖЭТФ, 1983, **85**, 1040.

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

Поступила в редакцию
5 декабря 1985 г.