УДК 539.21:537.1;538.9

И. Х. ЖАРЕКЕШЕВ

РАЗМЕРНОСТНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ОТ ИЗОЛЯТОРА К ПРОВОДНИКУ

Казахский Национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы

Исследуется зависимость критической статистики уровней энергии от числа измерений для фазового перехода изолятор-металл, вызванного разупорядочением. Получены численные результаты для пространственных размерностей d = 4, 5 и 6. Установлены свойства подобия и найдены критические значения беспорядка и критические индексы длины локализации.

Ключевые слова: *электронная проводимость, неупорядоченные системы, критические явления, квантовая локализация*

Статистическое описание электронных спектров в критической области вблизи перехода Андерсона в неупорядоченных системах показало значительную активность в течение последних лет [1]. Фактически переход от изолятора к проводнику означает, что существует критическое, как правило, ненулевое значение степени разупорядочения в системе, которое разделяет «диэлектрическую фазу» с локализованными состояниями от «металлической фазы» с распространенными (делокализованными) состояниями. Кроме базовой симметрии, пространственная размерность d играет важную роль в определении величины критического беспорядка, при котором наступает переход изолятор-проводник и наоборот.

Согласно однопараметрической гипотезе подобия для задач квантовой локализации [2] нижняя предельная размерность для перехода Андерсона равна $d_l = 2$. Это объясняется тем, что в двумерных неупорядоченных системах все электронные состояния полностью локализованы даже при сколь угодно исчезающем беспорядке [3]. Более того, путем применения скейлингового метода трансфер матриц были найдены все признаки андерсоновского фазового перехода в следующей высокой размерности $d_c = 4$ [4, 5]. Поскольку результаты этих работ противоречат предположению о верхней критической размерности для перехода Андерсона, которое основано на теории приближений [6], остается твердое сомнение, что этот эффект связан с граничными условиями, другими словами, с конечностью размеров исследованным образцов [7]. Хорошо известно, что для размерностей выше верхней граничной размерности d_c выводы теории среднего поля являются точными. Что касается статистики уровней энергии, были проведены крупномасштабные численные эксперименты, которые подтвердили существование перехода Андерсона и соответствующие однопараметрические критические свойства при $d \leq 3$ [8-10]. В частности, было найдено, что для двумерных систем распределение расстояний между ближайшими дискретными уровнями энергии $P(s)$ стремится к пуассоновскому предельному закону $P(s) = \exp(-s)$, указывая тем самым на отсутствие критической точки. Здесь спэйсинг s измеряется в единицах среднего расстояния между соседними энергетическими уровнями Δ. В трехмерных системах существование перехода металл-изолятор сопровождается переходом между распределением Вигнера в проводящей фазе и распределением Пуассона в диэлектрической фазе.

В критической точке перехода распределение спэйсингов $P(s)$ является совершенно отличающимся от двух вышеупомянутых фундаментальных распределений. При этом это «переходное» распределение не зависит от размеров исследуемого образца [8, 9]. Для малых расстояний между уровнями оно все же ведет себя как распределение Вигнера, в то время как на больших расстояниях (т.е. на больших масштабах энергий) ее асимптотический спад происходит значительно медленнее. Аналитические приближения дают следующую оценку

$$\ln P(s) \sim 1 + 1/d\nu, \tag{1}$$

где – критический индекс длины локализации [13,14]. С другой стороны, компьютерные вычисления с высокой точностью показали следующее поведение функции распределения

$$\ln P(s) \sim -s, \tag{2}$$

которое совпадает с предсказаниями, сделанными в работе [8]. Указанное противоречие является предметом продолжающихся дискуссий, которые включают также обсуждение важности фундаментальной симметрии – ортогональной и унитарной симметрий в трехмерных системах [15-17], и симплектической симметрии в двумерных системах [10,18]. В последних случаях значения критического беспорядка и критических индексов известны.

Ввиду вышеуказанных несоответствий нам представляется, что наиболее удачным для независимой проверки критичности является метод статистики уровней, который можно успешно применять для высоких размерностей. Им могут быть исследованы не только четырехмерные системы, как указывалось в работах [4,5], но и системы более высокой пространственной размерностьи. Например, для d = 5 и d = 6 необходимо найти критическую статистику уровней энергии и, в свою очередь, критические показатели длины локализации. Это нужно для того, чтобы проверить область справедливости имеющихся аналитических подходов. Кроме того, по результатам высокой точности, более ценная количественная информация о верхней критической размерности будет более доступна. Следует принять во внимание тот факт, что, с одной стороны, аналитические теории часто страдают неконтролируемыми погрешностями, которые происходят на основе различного рода приближений. Но с другой стороны, численные моделирования подвержены неизбежной критике за не некорректное исключение систематических ошибок вследствие конечности размеров исследуемых систем. Поэтому представляется очень важным учесть нежелательные эффекты, связанные с конечностью размеров систем особенно для высокой размерности пространства.

На рис. 1 демонстируется наглядный, и в то же время яркий пример того, как дискретные уровни энергии меняют свое взаимное положение в спектре по мере того как степень беспорядка нарастает. Особенно четко наблюдается граница между двумя коллективными типами поведения для малых и больших степеней беспорядка. Слева от положения стрелок, соответствующего критическому значению бепорядка Wc = 16.5 для трехмерных систем, спектр более упорядочен и флуктуации уровней незначительны. Это говорит о том, что спектральные корреляции велики и система уровней энергии более жесткая. При этом наблюдается явление отталкивания уровней энергии. Такая ситуация соответствует проводящей фазе, то есть металлической стороне фазового перехода Андерсона.

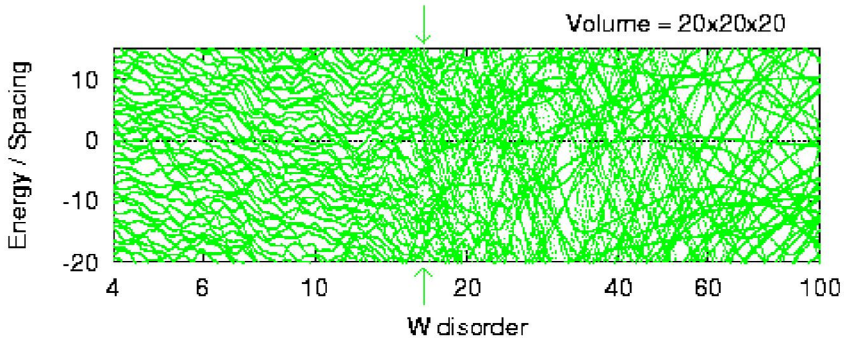

Рис. 1. Энергетический дискретный спектр модели Андерсона для неупорядоченной тремерной кубической системы со стороной L = 20 как функция степени беспорядка W для одной реализации узловых потенциалов. Фазовый переход проводник-изолятор соответствует резкому изменению поведения спектра при увеличении беспорядка W (слева направо). Стрелками показано положение критического значения беспорядка Wc = 16.5

Справа от стрелок, то есть для $W > Wc$ электронный спектр резко меняет свой характер. Флуктуации становятся более хаотическими, а электронные термы могут пересекаться – отталкивание уровней энергии исчезает. Эта фаза соответствует диэлектрической стороне перехода проводник-изолятор. Таким образом, даже по одной реализации случайного потенциала можно идентифицировать критическую точку перехода и найти значение критического беспорядка. Мониторинг по множеству уровней энергии в спектре единственного образца эквивалентен усреднению по ансамблю образцов. Таким образом, условие эргодичности выполняется.

В этой статье мы докладываем результаты численного моделирования по статистике уровней энергии в четырехмерных, пятимерных и шестимерных неупорядоченных системах. Показано, что функция распределения расстояний между ближайшими уровнями энергии проявляет критическое поведение вплоть до высокой размерности d = 6. Они размерно-независимы (т.е. удовлетворяют условию универсальности в термодинамическом пределе). При определенных значениях беспорядка W = 34.5, W = 57.3 и W = 85.0, соответственно для d = 4, d = 5 и d = 6, наступает переход от проводника к изолятору, что в значительно отличается от результата в обычных трехмерных системах W = 16.5 [15]. На нижней границе андерсоновского перехода d_l = 2 все электронные состояния локализованы независимо от энергии и степени конечного беспорядка. Естественно предположить, что в этом случае распределение Вигнера может служить критическим распределением, отвечающим критическому беспорядку Wc = 0.

С другой стороны, на верхней границе размерности для перехода металл-изолятор d_u все состояния делокализованы при любом сколь угодно большом значении беспорядка. Статистика уровней энергии для конечных W не проявляет никаких критических особенностей и всегда управляется теорией Вигнера-Дайсона. Отсюда можно сделать предположение, что закон Пуассона играет роль критического распределения на верхней границе перехода d_u.

Анализируя скэйлинговые свойства статистики уровней, мы определяем величины критических показателей длины локализации ν = 1.1 и ν = 0.7 для размерностей d = 4 и d = 5. Из-за сравнительно малых размеров систем, которые были достигнуты для размерности d = 6, вычисленное значение критического индекса имеет порядок систематической ошибки, поэтому мы его здесь его не приводим. Однако на основании уже полученных результатов можно сделать вывод о том, что критический индекс падает с ростом размерности. Этот факт качественно совпадает с теорией среднего поля [6], которая утверждает, что в пределе бесконечной размерности значение критического индекса является точным и равно ν = 0.5.

Мы также нашли, что критическая статистика уровней специфична для каждой размерности, то есть функция распределения расстояний между уровнями энергии и спектральные корреляции зависят от числа размерностей, которое имеет исследуемая неупорядоченная система. Причем критическое распределение само испытывает непрерывный переход от распределения Вигнера для двумерных систем к закону Пуассона при увеличении размерности d. Точное пуассоновское распределение достигается в пределе бесконечно-размерных систем.

Рассуждая далее в духе полевой теории, можно предположить, что верхняя критическая размерность для перехода Андерсона является бесконечной, т.е. $d_c = \infty$, а не d_c = 4, как утверждалось в работах [4, 5]. В этом заключается ключевой момент этой работы.

При численном моделировании мы использовали гамильтониан Андерсона для неупорядоченных систем. В представлении вторичного квантования он имеет следующий вид.

$$\mathrm{H} = I\left[\sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \sum_{i \neq j} (a_j^+ a_i + h.c.)\right], \tag{3}$$

где a^+_i и a_i – операторы рождения и аннигиляции, соответственно, состояния на узле i гиперкубической решетки; j – номера шести ближайших к решетке соседей узла i; ε_i – случайная энергия узлов; I – интеграл перекрытия ближайших узлов; $h.c.$ – эрмитово сопряжение. Для численном моделировании мы применяли случайное равномерное распределение локальных энергий узлов ε_i в интервале от -W/2 до W/2.

На рис. 2 показано поведение спектрального коррелятора R(s) для разной степени беспорядка W в четырехмерной и шестимерной системе. Видно, что с увеличением числа размерности от d = 3 до d = 4 кривая для критического коррелятора прижимается к оси ординат. Это означает, что спектральные корреляции ослабевают с ростом размерности пространства.

Чтобы определить скейлинговый сценарий, мы изучили зависимость статистики энергетических уровней от пространственной размерности на фазовом переходе изолятор-проводник. Для этого вычислялась зависимость дисперсии спейсинга Jo от степени беспорядка W. Точки пересечения кривых $Jo(W)$ соответствуют критическим значениям беспорядка W_c. Было установлено, что с увеличением числа измерений критический беспорядок растет. Одновременно растет критическое значение дисперсии спейсингов Jo (ординаты точек пересечений), что свидетельствует о кроссовере критической статистики уровней от распределения Вигнера к предельному закону Пуассона.

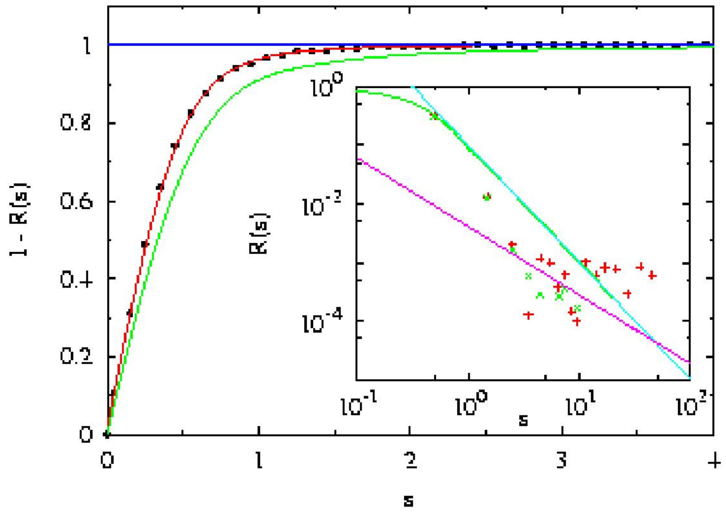

Рис. 2. Двухуровневая корреляционная функция R(s) для размерности d = 4 и d = 6 для различной степени беспорядка *W*, полученная в результате диагонализации гамильтониана (3) для различных гиперрешеток. На вставке приведена асимптотика коррелятора

Таким образом, увеличивая пространственную размерность от d = 3 до d = 6, мы обнаружили непрерывный переход спектральных корреляций от результатов теории хаотических матриц, справедливой для проводящей фазы, до пуассоновского предела совершенно некоррелированных переменных, которым управляется изолирующая фаза. Аналогичный результат был получен ранее в работе [5], где использовался другой метод, а именно процедура трансфер-матриц, которая больше соответствует задачам на квантово-механическом рассеянии.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zharekeshev I.Kh. Spectral density of states in quantum nanoclusters // Вестник КазНУ, серия физическая. – 2010. – Т. 32, № 1. – С. 47-50.
2. Abrahams E., Anderson P.W., Licciardello D.C., Ramakrishnan T.V. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions // Phys. Rev. Lett. – 1979. – V. 42, N 10. – P. 673-676.
3. Kramer B., MacKinnon A. Localization: theory and experiment // Rep. Prog. Phys. – 1993. – Vol.56. – P. 1496-1564; MacKinnon A. Critical exponents for the metal-insulator transition // J. Phys.: Condens. Matter. – 1994. – V. 6. – P. 2511-2516.
4. Markos P. Metal-insulator transition in two-dimensional Ando model // J. Phys. I France. – 1994. – V. 4. – P. 551-564.
5. Schreiber M., Grussbach H. Dimensionality dependence of the metal-insulator transition in the Anderson model of localization // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 76. – P. 1687-1690
6. Efetov K.B. Supersymmetry in Disorder and Chaos. – Cambridge: Cambridge University, 1997. – 540 p.
7. MacKinnon A., Kramer B. One-parameter scaling of localization length and conductance in disordered systems // Phys.Rev.Lett. – 1981. –V. 47. – P. 1546-1549.
8. Shklovskii B.I., Shapiro B., Sears B.R., Lambrianides P., Shore H.B. Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 47. – P. 11487-11490.
9. Hofstetter E., Schreiber M. Relation between energy-level statistics and phase transition and its application to the Anderson model // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 49. – P. 14726-14729.
10. Batsch M., Zharekeshev I.Kh, Kramer B. Decimation algorithm for the statistics of energy levels // Sol. State Commun. – 1995. – V. 95. – P. 353-356.
11. Wigner E.P. Statistical theories of spectral fluctuations / ed. by C.E. Porter. – New York: Acad. Press, 1965. – 576 p.
12. Mehta M.L. Random Matrices. – Boston: Academic Press, 1991. – 532 p.
13. Aronov A.G., Kravtsov V.E., Lerner I.V. Spectral correlations in disordered electronic systems: Crossover from metal to insulator regime // Phys. Rev. Lett. – 1995. – V. 74. – P. 1174-1177.
14. Kravtsov V.E., Lerner I.V., Altshuler B.L., Aronov A.G. Universal spectral correlations at the mobility edge // Phys. Rev. Lett. – 1994. – V. 72. – P. 888-891.
15. Zharekeshev I.Kh., Kramer B. Scaling of level statistics at the disorder-induced metal-insulator transition // Phys. Rev. B. – 1995. – V. 51. – P. 17239-17242.
16. Evangelou S.N. Level-spacing function P(S) at the mobility edge // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 49. – P. 16805-16808.
17. Batsch M., Schweitzer L., Zharekeshev I.Kh., Kramer B. Crossover from Critical Orthogonal to Critical Unitary Statistics at the Anderson Transition // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – P. 1552-1555.
18. Schweitzer L., Zharekeshev I.Kh. Critical level spacing distribution of two-dimensional disordered systems with spin-orbit coupling // J. Phys.: Condens. Matter. – 1995. – V. 7. – P. L377-L382.

И. Х. Жәрекешев

ИЗОЛЯТОРДАН ӨТКІЗГІШТІККЕ ФАЗАЛЫҚ АУЫСУДЫҢ
ӨЛШЕМДІЛІК БАЙЛАНЫСТЫЛЫҒЫ

Изолятор-металдың ретсіздіктен туындайтын фазалық ауысуы үшін энергия деңгейлері критикалық статистикасының өлшеулер санына байланыстылығы зерттелген. d = 4, 5 және 6 кеңістіктік өлшемдер үшін сандық қорытындыларға қол жеткізілген. Ұқсастықтың қасиеттері анықталған ретсіздіктің критикалық өлшемі және локализация ұзындылығының критикалық көрсеткіштері табылған.

Түйін сөздер: электрондық өткізгіштік, реттелмеген жүйелер, критикалық құбылыстар, кванттық локализация.

I. Kh. Zharekeshev

DIMENSIONALITY DEPENDENCE OF THE PHASE TRANSITION
FROM INSULATOR TO CONDUCTOR

The dependence of the critical statistics of the energy levels on the number of dimensions is investigated for the phase transition insulator-conductor induced by randomness. The numerical results for special dimensionalities d = 4, 5 and 6 are obtained. The scaling properties are established and the critical values of disorder and the critical indices of the localization length are found.

Key words: electron conductivity, disordered systems, critical phenomena, quantum localization.

КазНУ им. аль-Фараби,
г. Алматы

Поступила 20.12.2012 г.