

УДК 539.2
©1995

САМОСОГЛАСОВАННОЕ ОПИСАНИЕ ОДИНОЧНЫХ И КОЛЛЕКТИВНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПРИ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ФЕРМИОНОВ

А.И.Олемской, И.В.Коплык, А.А.Колосков

Сумский государственный университет
(Поступила в Редакцию 1 апреля 1994 г.
В окончательной редакции 8 декабря 1994 г.)

В рамках локаторного подхода Андерсона показано, что щель в спектре одиночных возбуждений определяет плотность делокализованных состояний фермионов. Найдена ее зависимость от ширины разброса уровней и сдвига химического потенциала из центра зоны. Определен закон дисперсии соответствующей коллективной моды. Для заряженных фермионов она имеет обычный диффузионный вид, а для нейтральных (квантовые кристаллы) в длинноволновом пределе появляется звуковая мода нулевых колебаний плотности делокализованных фермионов. Исследована зависимость скорости звука и характерных значений его частоты и волнового числа от температуры и параметра квантовой дилатации.

Хорошо известны взаимодополняющие подходы Андерсона [1] и Эдвардса [2], представляющие переход между локализованным и делокализованным состояниями фермиона в случайном поле [3]. В рамках узельного представления Андерсона за исходное состояние принимается локализованное, а переход состоит в образовании зоны делокализованных состояний. Использование волнового подхода Эдвардса предполагает, напротив, что исходным является делокализованное состояние, а перестройка системы связана с локализацией. С момента представления указанных моделей вышло множество работ (см., например, [3-10]), причем в большинстве из них исследовалось поведение коллективных возбуждений в представлении Эдвардса. Кроме очевидных методических преимуществ это объясняется, очевидно, еще и тем, что определение основных экспериментально измеримых величин (типа проводимости и поляризации при переходе Мотта) наиболее естественным образом достигается в рамках такого подхода. Однако при этом оказывается беспредметным вопрос о нахождении одночастичных характеристик типа ширины зоны и плотности делокализованных состояний.

Наряду с указанной дуальностью следует отметить еще и такую особенность: несмотря на одночастичный характер задачи, поведение системы напоминает особенности, присущие фазовому превращению, изначальной причиной которого является межчастичное взаимо-

действие.¹ В этой связи возникает вопрос о природе эффективного взаимодействия, возникающего в одночастичной задаче со случайным потенциалом. Здесь также оказываются возможными два подхода: локальное представление, основывающееся на схеме Андерсона, и пропагаторное приближение Эдвардса.

В рамках первого подхода возмущение системы связано с перекрытием волновых функций. Оказалось, что гамильтониан Андерсона имеет вырождение относительно перестановочной симметрии узловой волновой функции системы [4]. При снятии этого вырождения одночастичная задача сводится к узловому 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 [5]. Локальный подход позволит представить не только одночастичные особенности, но и описать коллективную моду диффузии частицы в случайном потенциале. Самосогласованное рассмотрение двухчастичной гриновской функции $\varphi(\mathbf{K}, \Omega)$ показало [6], что в пределах малых значений волнового вектора \mathbf{K} и частоты Ω коллективных возбуждений она имеет характерную особенность $\varphi \propto (\Omega + iD\mathbf{K}^2)^{-1}$, полюс которой определяется коэффициентом диффузии D . Отметим, что схема самосогласования [5] позволила найти поведение системы во всей области разброса уровней W , тогда как диаграммный метод [6] представляет только режимы слабой ($W \ll W_c$) и сильной ($W \lesssim W_c$) связи, где W_c критический разброс уровней.

В рамках пропагаторного подхода роль возмущения играет случайный потенциал. Диаграммное исследование [7,8] коллективной моды позволило не только представить диффузионный полюс функции $\varphi(\mathbf{K}, \Omega)$, но и доказать, что завуление коэффициента диффузии обеспечивается не лестничной последовательностью, члены которой взаимно уничтожаются, а веерными диаграммами, получающимися из лестничных поворотом дырочного пропагатора. Однако подход [7,8] 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 [9,10]. Он основывается на технике Цванцига–Мори, где коррелятор $\varphi(\Omega)$ плотности фермионов выражается в виде цепной дроби второго порядка. Ее ядро $M(\Omega) = -\Omega + i/D(\Omega)$ представляет коррелятор силы, действующей на частицу, и описывает эффекты памяти. Приближение связанных мод состоит в том, что функция памяти $M(\Omega)$ выражается через исходный коррелятор $\varphi(\Omega)$ в виде линейного соотношения $M(\Omega) = \lambda\varphi(\Omega)$, где эффективная константа связи $\lambda \propto W^2$ определяется шириной W разброса энергетических уровней, причем именно отсутствие взаимодействия обеспечивает линейный характер связи $M \propto \varphi$.

¹ Строго говоря, переход Андерсона является примером потери эргодичности [11] типа наблюдаемой в спиновых стеклах. Однако и при описании последних [12] используется схема, присущая теории фазовых переходов. При этом эффективное взаимодействие появляется после усреднения стохастического функционала по значениям обменного интеграла.

Самосогласованное исследование системы показало [10], что в статическом пределе $\Omega \rightarrow 0$ частотные зависимости коэффициента диффузии и сжимаемости, $D(\Omega)$ и $g(\Omega)$, имеют следующий вид: $D(\Omega) = \text{const} = D$, $g(\Omega) = i(\rho/m)D/\Omega$ — в делокализованном состоянии; $g(\Omega) = \text{const} = g$, $D(\Omega) = i(m/\rho)g\Omega$ — в локализованном (здесь m , ρ — масса и объемная концентрация частиц). При этом статические константы D , g вблизи критического разброса уровней W_c ведут себя корневым образом.

Хотя совмещение подходов Андерсона и Эдвардса взаимно дополняет картину делокализации, совершенно ясно, что чисто механическое их объединение не может вызвать удовлетворения. Вместе с тем недавно появилась работа [13], где на основе совместного рассмотрения фермиевских и бозевских возбуждений сверхпроводника показано, что обычный случай описывается теорией БКШ, а ВТСП — на основе концепции о бозе-эйнштейновской конденсации сильно связанных куперовских пар. При этом вершинная функция, определяющая собственно энергетическую функцию фермионов, играет роль гриновской функции бозонов, отвечающих куперовским парам. В результате совместного рассмотрения [13] фермиевской и бозевской функций Грина позволило самосогласованным образом описать одиночные и коллективные возбуждения сверхпроводника.

Предлагаемая работа посвящена выполнению программы [13] на основе локального представления перехода Андерсона. Дополнительная сложность состоит здесь в том, что требуется предварительно выделить эффективное взаимодействие. Это выполняется в разделе 1 по аналогии с переходом от гамильтониана Фрелиха к модели БКШ [14]. Затем стандартным образом выводится уравнение Дайсона для фермиевской функции Грина, собственно энергетическая функция которой выражается через вершинную функцию взаимодействия фермионов. Для последней найдено уравнение типа Бете-Солпитера, замыкающее самосогласованное описание системы. В разделе 2 полученные уравнения используются для описания одиночных возбуждений, в разделе 3 — коллективных. Показано, что использованная схема позволяет не только представить особенности поведения делокализованных состояний фермиона и диффузионную моду, но и дать микроскопическую картину появления звуковой моды, связанной с нулевыми колебаниями плотности делокализованных фермионов. Такая мода реализуется в квантовых кристаллах типа He^3 [15].

1. Построение самосогласованной схемы

Поскольку при описании разных типов возбуждений удобно исходить из различных (узельного или волнового) представлений модели Андерсона, то, не используя явный вид соответствующего гамильтониана, прибегнем к диаграммному методу. Это позволит получить общий вид уравнений для необходимого набора гриновских функций.

Согласно [4,5], принципиально важным обстоятельством является обусловленное нарушением перестановочной симметрии расщепление пространства состояний на две составляющие, отвечающие невозбужденному и возбужденному состояниям системы. Поэтому узлы должны характеризоваться не только их номерами l , t , но и индексами состояний всей системы α , $\beta = 1, 2$. Наличие этих состояний отвечает

разделение ансамбля фермионов на возбуждения частичного и вакансионного/дырочного типов. В отличие от исходной модели Андерсона [1], где принималось, что функция распределения $P(\varepsilon_l)$ имеет форму ступеньки шириной W , технически удобнее использовать распределе-

$$P(\varepsilon) = W^{-1} \exp(-2|\varepsilon - \bar{\varepsilon}|/W), \quad (1)$$

где $\bar{\varepsilon} = N_0^{-1} \sum_l \varepsilon_l$ — среднее значение энергии N_0 уровней. Выбор распределения уровней не может, как известно [1-3], изменить качественным образом картину явления. Вместе с тем использование зависимости (1), формально совпадающей с распределением Гиббса, позволит нам построить статистическую теорию рассматриваемых случайных систем по аналогии с теорией термодинамических ансамблей, характеризованных «температурой» $W/2$ [14]. С физической точки зрения это означает, что описание ансамбля «холодных переменных» ε_l проводится по аналогии с обычным представлением «горячих переменных» (типа спинов в модели Изинга) [16].

Учитывая указанную аналогию, для описания рассматриваемой системы можно использовать мадубаровскую функцию Грина

$$G_{lm}^{\alpha\beta}(t) = -\langle \hat{T} \psi_{l\alpha}(t) \psi_{m\beta}^+(0) \rangle,$$

где t — мнимое время, угловые скобки означают усреднение по квантовым состояниям фермиона, остальные обозначения стандартны [14]. Используя фермиевские свойства системы, нетрудно показать, что нормальные (диагональные) и аномальные (недиагональные) компоненты обладают свойствами $G_{ml}^{22}(-t) = G_{lm}^{11}(t) \equiv G_{lm}(t)$, $-G_{lm}^{21*}(t) = G_{lm}^{12}(t) \equiv F_{lm}(t)$, благодаря которым достаточно исследовать поведение только двух компонент — нормальной $-G = \frac{1}{1}$ и аномальной $-F = \frac{1}{2}$. С учетом данного обстоятельства далее при проведении выкладок удобно использовать матричное представление типа $\hat{G}_{lm}(t)$, где шляпка отвечает перебору индексов α, β . Отметим, что, как и в обычной статистической теории [14], используемые мадубаровские функции обладают свойством антипериодичности с периодом $2/W$, в связи с чем их фурье-образ по t характеризуется набором частот $\omega_s = \pi(2s + 1)W/2$, $s = 0, \pm 1, \dots$. Что касается путей отбора нужных диаграмм, то здесь по тем же причинам, что и в теории термодинамических систем [14], следует учитывать только связанные графики. При этом не возникает необходимости прибегать к методу реплик [17].

Кроме матричного характера функции Грина наличие подпространств $\alpha = 1, 2$ приводит к двум типам затравочных вершин: $\begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array}$ и $\begin{array}{|c|} \hline 2 \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline 2 \\ \hline \end{array}$, где сплошная линия отвечает компонентам локаторной функции Грина частицы или вакансии, штриховая — интегралу перекрытия [5,6]. Как и в теории сверхпроводимости (см. [14]), технически удобнее перейти от треххвостных вершин к соответствующим четыреххвосткам $\begin{array}{c} \gamma \\ \delta \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \alpha \\ \hline \beta \end{array} = -V_{\gamma\delta, \alpha\beta}$ эффективного взаимодействия. Поскольку

за делокализацию ответственно взаимодействие между фермионами, принадлежащими различным состояниям системы, то отличны от нуля только компоненты $V_{12,12} \equiv V_{11}$, $V_{21,21} \equiv V_{22}$, $V_{12,21} \equiv V_{12}$, $V_{21,12} \equiv V_{21}$, образующие матрицу \hat{V} второго ранга. Подобным образом устроена также и матрица $-\hat{\Gamma} = \text{---}$ вершинной функции. Однако если для затравочного взаимодействия матрица \hat{V} , очевидно, диагональна, то полная вершина $\hat{\Gamma}$ имеет, как будет показано далее, все ненулевые компоненты.

В диаграммной записи матричное уравнений Дайсона имеет обычный вид $[^{14}] = = \text{---} + \text{---} \text{---}$, где двойная линия отвечает точной функции Грина, а одинарная — затравочной (матрица последней диагональна). Собственно энергетическая функция $\text{---} \text{---} = -\hat{\Sigma}$, выражается равенством $\text{---} \text{---} = \text{---}$. Таким образом, задача

сводится к самосогласованному определению вершинной функции $\hat{\Gamma}$. Подобно $[^{14}]$ можно показать, что при разложении по \hat{V} основной вклад вносят члены, содержащие поляризатор $\text{---} \text{---} = \hat{\Pi}$, матричные компоненты $\Pi_{\alpha\beta}$ которого определены аналогично $V_{\alpha\beta}$, $G_{\alpha\beta}$. Тогда соответствующий ряд сводится к лестничной последовательности, которую можно представить в виде уравнения Бете-Солпитера $\text{---} \text{---} = \text{---} + \text{---}$. Оно замыкает систему уравнений для самосогласованного описания частицы в случайном поле.

В аналитическом представлении эта система записывается в виде

$$\hat{G}^{-1}(\omega_s) = i\omega_s \hat{\tau}_3 - (\varepsilon - \mu)\hat{\delta} - \hat{\Sigma}(\omega_s), \quad (2a)$$

$$\Sigma_{\alpha\beta}(t) = G_{\beta\alpha}(-t)\Gamma_{\alpha\beta}(t), \quad (2b)$$

$$\hat{\Gamma}^{-1}(\Omega_S) = \hat{V}^{-1} + \hat{\Pi}(\Omega_S), \quad (2c)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}(t) = G_{\alpha\beta}(t)G_{\alpha\beta}(-t). \quad (2d)$$

Здесь $\omega_s = \pi(2s + 1)W/2$, $\Omega_S = \pi(2S + 1)W/2$ — частоты одиночного и коллективного возбуждений, определяемые целыми числами $s, S = 0, \pm 1, \dots$ и «температурой» $W/2$, $\hat{\delta}$ — единичная матрица, $\hat{\tau}_3$ — диагональная матрица Паули, ε — затравочная энергия фермиона, отсчитанная от уровня химического потенциала μ . При выводе уравнения (2c) для вершинной функции $\hat{\Gamma}$ принято, что затравочный потенциал сводится к постоянной \hat{V} , а при построении (2d) поляризатора $\Pi_{\alpha\beta}$ учитывается, что определяющий вклад дают гриновские функции пары частица-вакансия (в рамках обычного подхода $[^{6-8}]$ это отвечает использованию произведения запаздывающей и опережающей функций Грина). Характерная черта полученной системы состоит в том, что явные выражения (2a,c) для гриновских функций \hat{G} , $\hat{\Gamma}$ одиночных и коллективных возбуждений достигаются в частотном представлении,

тогда как выражения (2b,d) для соответствующих собственно энергетических функций $\hat{\Sigma}$, $\hat{\Pi}$ требуют использования временного. Что касается узельного и волнового представлений, то их выбор зависит от того, какой тип возмущений имеется в виду.

2. Одиночные возмущения

Будем исходить из узельного гамильтониана Андерсона

$$\mathcal{H} = \sum_{l\alpha} (\varepsilon_l - \mu) \psi_{l\alpha}^+ \psi_{l\alpha} + \sum_{lm\alpha} I_{lm} \psi_{l\alpha}^+ \psi_{m\alpha}, \quad (3)$$

где ε_l — случайно разбросанные значения энергетических уровней, I_{lm} — интеграл перекрытия узлов l, m (далее считается, что он принимает ненулевое значение I только для z ближайших соседей). Соответственно функциям \hat{G} , ε , $\hat{\Sigma}$ в уравнении (2a) и $\hat{\Gamma}$, \hat{V} , $\hat{\Pi}$ в (2c) должен быть приписан индекс l , а расщепление соответствующих сверток (2b), (2d) достигается при переходе к волновому представлению. Такого рода инверсия узельного и волнового представлений в корне отличает используемый локальный подход от пропагаторного представления Эдвардса.

Если интересоваться только поведением одиночных возмущений [5], то наиболее простым образом их описание может быть достигнуто в рамках метода квазисредних. Он основывается на введении аномальных квазисредних

$$\eta = \frac{2}{N_0} \sum_l \langle \psi_{l2}^+ \psi_{l1} \rangle, \quad \eta^* = \frac{2}{N_0} \sum_l \langle \psi_{l1}^+ \psi_{l2} \rangle, \quad (4)$$

где $\psi_{l\alpha} = z^{-1} \sum_m \psi_{l+m,\alpha}$, суммирование проводится по z ближайшим соседям. Согласно (4), величина η определяет амплитуду перехода из состояния $\alpha = 1$ на узле l в состояние $\alpha = 2$ на «соседнем» узле \bar{l} (и обратно — для η^*). Поскольку именно такие виртуальные переходы отвечают элементарным актам процесса делокализации, то можно полагать, что квазисредние (4) представляют параметр порядка, характеризующий процесс делокализации. При этом роль упорядоченной фазы играет делокализованное состояние, а неупорядоченной — локализованное. Последнее обладает более высокой симметрией относительно перестановок уровней ε_l по узлам решетки \mathbf{r}_l [5]. Действуя стандартным образом [14], нетрудно видеть, что параметр порядка (4) определяет ширину щели $\Delta = V\eta$ и связан с аномальной функцией Грина равенством

$$\eta = (W/N_0) \sum_s \sum_l \overline{F_l(\omega_s)}.$$

Имея в виду совместное исследование одиночных и коллективных возмущений, воспользуемся гриновским методом. Для вычисления

поляризатора $\hat{\Pi}$ будем использовать функцию Грина $\hat{G}_l(\omega_s) = (i\omega_s\hat{\tau}_3 - \epsilon_l\hat{\delta})^{-1}$, где ϵ_l — перенормированная энергия узла, подлежащая определению. Тогда для поляризатора

$$\Pi_l^{\alpha\beta}(\Omega_S) = W \sum_{s=-\infty}^{\infty} N_0^{-1} \sum_m G_{l+m}^{\alpha\alpha}(\Omega_S + \omega_s) G_m^{\beta\beta}(\omega_s), \quad \alpha \neq \beta, \quad (5)$$

где N_0 — полное число узлов, получаем

$$\hat{\Pi}_l(\Omega_S) = \Pi(\Omega_S)\hat{\tau}_1,$$

$$\Pi(\Omega_S = 0) = N_0^{-1} \sum_m \epsilon_m^{-1} \text{th}(\epsilon_m/W), \quad \hat{\tau}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

В силу макроскопической эквивалентности узлов в (6) отсутствует зависимость от их номера l .

Фурье-образ $\hat{V}(\mathbf{k})$ потенциала эффективного взаимодействия определяется произведением квадрата затравочной трехвостки $\Delta_0 = z|I|$ на соответствующий фурье-образ $\hat{G}_s(\mathbf{k}) = (i\omega_s\hat{\tau}_3 - \epsilon(\mathbf{k})\hat{\delta})^{-1}$ гриновской функции делокализованных частиц с энергией $\epsilon(\mathbf{k}) = N_0^{-1} \sum_l \epsilon_l \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_l)$, \mathbf{r}_l — радиус-вектор узла l . Учитывая отсутствие пространственной дисперсии указанных величин, в пределе $\omega_s, \mathbf{k} = 0$ получаем $\hat{V}(\mathbf{k}) = -V\hat{\delta}$, где $V = \Delta_0^2/\epsilon$, $\epsilon = N_0^{-1} \sum_l \epsilon_l$. Следуя [5], далее удобно совершить переход $\sum_l \rightarrow N_0 \int P(\epsilon)d\epsilon$ от суммирования по узлам l к усреднению по статансамблю состояний ϵ , задаваемому распределением (1). В результате условие расходимости вершины (2с) при $\Omega_S = 0$ приводит к уравнению

$$\Delta_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{th}[\epsilon(x)/W]}{\epsilon(x)} e^{-|x|} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(x) e^{-|x|} dx, \quad (7)$$

где $x = 2(\epsilon - \bar{\epsilon})/W$, $\Delta_0 = z|I|$.

Равенство (7) получено из условия появления моды коллективных возбуждений. Для определения закона дисперсии $\epsilon(x)$ одиночных следует найти явный вид гриновской функции (2а). С этой целью учтем, что, как и в теории сверхпроводимости, собственно энергетическая функция $\hat{\Sigma}$ приобретает при делокализации недиагональные составляющие $\Sigma_{12} = \Sigma_{21}^* = \Delta$, отвечающие щели Δ в энергетическом спектре одиночных возбуждений [14]. Тогда диагонализация матрицы \hat{G} приводит к выражениям

$$G_l(\omega_s) = -\frac{i\omega_s + (\epsilon_l - \mu)}{\omega_s^2 + \epsilon_l^2}, \quad F_l(\omega_s) = \frac{\Delta}{\omega_s^2 + \epsilon_l^2},$$

$$\epsilon_l = [(\epsilon_l - \mu)^2 + |\Delta|^2]^{1/2}. \quad (8)$$

Подставляя их в уравнение (2b) для недиагональных компонент и принимая, что здесь вершина $\hat{\Gamma}$ сводится к затравочному потенциалу \hat{V} , приходим к уравнению самосогласования, которое, как и следовало ожидать, совпадает с равенством (7) для щели Δ .

Кроме разброса уровней W состояние системы определяется концентрацией локализованных частиц $n = N/N_0$, где N — их число, определяемое равенством $N = W \sum_s \sum_l G_l(\omega_s)$. Подставляя сюда первое из соотношений (8), находим

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-|x|} \frac{E - Wx/2}{\epsilon(x)} \operatorname{th} \frac{\epsilon(x)}{W} dx = n, \quad (9)$$

где

$$\epsilon(x) = [(Wx/2 - E)^2 + |\Delta|^2]^{1/2}.$$

Система уравнений (7), (9), дающая самосогласованное описание одиночных возбуждений, позволяет по заданным значениям разброса уровней W и концентрации n найти ширину щели $|\Delta|$ и сдвиг E химического потенциала из центра зоны. Численное решение этих уравнений приводит к зависимостям, показанным на рис. 1, 2. Прежде чем приступить к их анализу, установим смысл параметра порядка $\eta = |\Delta|/V$. Из уравнения (7) нетрудно видеть, что в отсутствие разброса уровней зависимость $\eta(E)$ имеет вид $\eta^2 = 1 - (E/zI)^2$, присущий плотности состояний $g(E) = (2/\pi z|I|)\eta(E)$ идеального кристалла. Тогда, учитывая, что, согласно (8), ширина щели определяет величину аномальной функции Грина $F_l(\omega_s)$, суммирование которой по частотам ω_s и узлам l дает число делокализованных частиц, можно заключить, что в общем

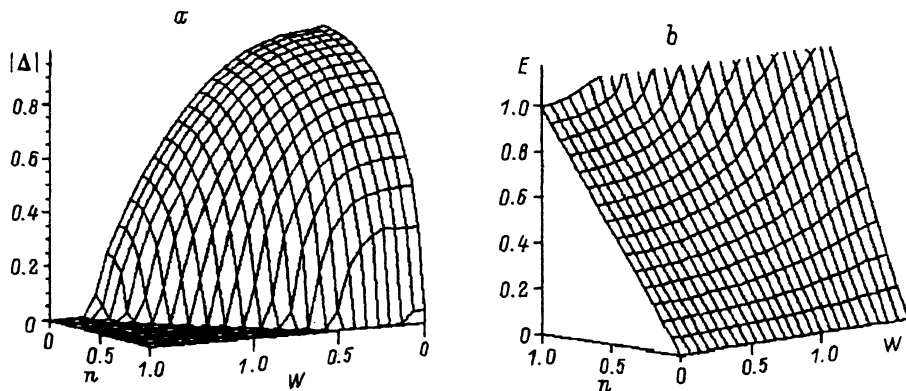


Рис. 1. Зависимость ширины щели $|\Delta|$ одиночных возбуждений (а) и сдвига E химического потенциала из центра зоны (б) от ширины разброса уровней W и концентрации n .

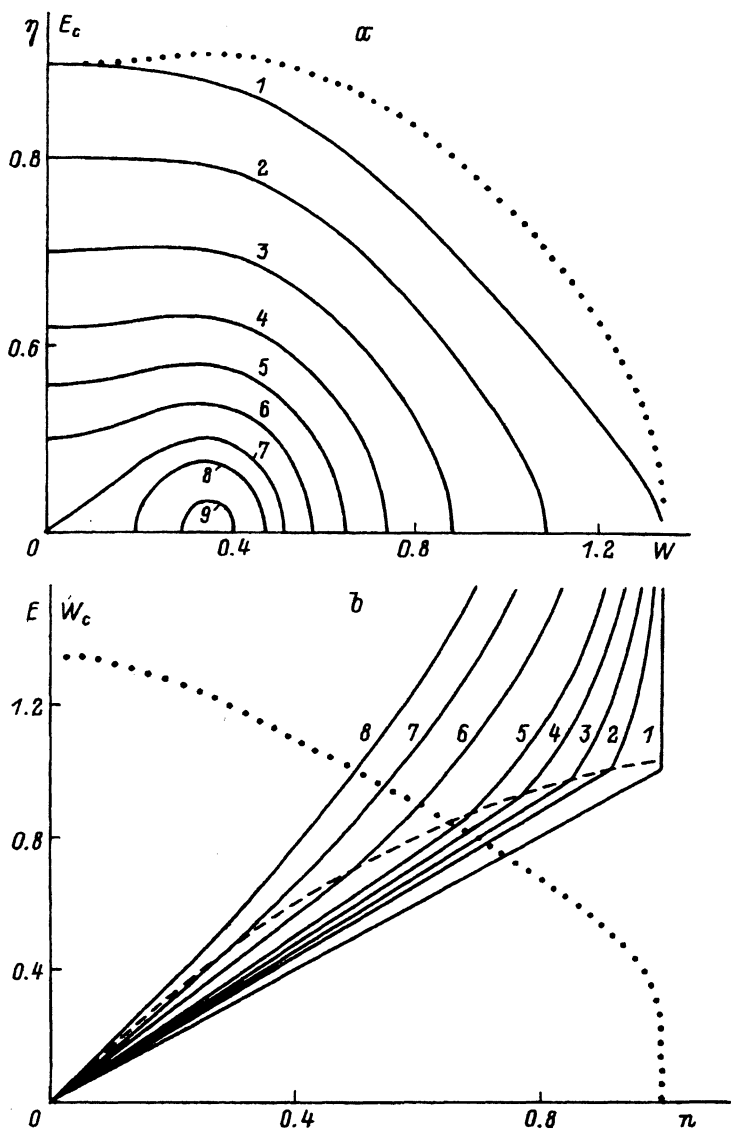


Рис. 2. а) Зависимость параметра порядка η (сплошные линии) и ширины зоны делокализованных состояний E_c (пунктирная линия) от разброса уровней W . б) Концентрационные зависимости сдвига E химического потенциала из центра зоны (сплошные линии), значения E_c , при которых раскрывается зона делокализованных состояний (штриховая линия), и критического разброса уровней W_c (пунктирная линия).

Значения E сдвига химического потенциала из центра зоны (а): 1 — 0, 2 — 0.6, 3 — 0.8, 4 — 0.9, 5 — 0.95, 6 — 0.98, 7 — 1.00, 8 — 1.01, 9 — 1.02. Значения ширины разброса уровней W (б): 1 — 0, 2 — 0.5, 3 — 0.6, 4 — 0.7, 5 — 0.8, 6 — 1.0, 7 — 1.2, 8 — 1.4.

случае $W \neq 0$ зависимость $\eta(W, E)$ определяет плотность делокализованных состояний неидеального кристалла при энергии E .²

Как видно из рис. 1, *a*, ширина щели $|\Delta|$ монотонно спадает с ростом разброса уровней W и концентрации n локализованных частиц, принимая нулевое значение на линии $W_c(n)$, монотонно спадающий вид которой показан пунктиром на рис. 2, *b*. Аналитическое определение соответствующих зависимостей с логарифмической точностью приводит к предельным соотношениям³

$$\begin{cases} \Delta^2 = 1 - W^2/2 - (1 + W^2)n^2 & \text{при } W \ll 1, \\ \left(\frac{\Delta}{W_{c0}}\right)^2 \ln\left(\frac{\Delta}{W_{c0}}\right) = \frac{W - W_{c0}}{W_{c0}} & \text{при } W_{c0} - W \ll W_{c0}, n = 0; \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} W_c = W_{c0}(1 - an^2), a^{-1} = 8(\ln 4 - 1)^2 \ln(\pi/2) = 0.539 & \text{при } n \ll 1, \\ W_c = 2/\ln(1 - n)^{-1} & \text{при } 1 - n \ll 1; \end{cases} \quad (11)$$

$$W_{c0} = 2\sqrt{\ln(\pi/2)} \simeq 1.344.$$

Здесь и далее все величины размерности энергии измерены в единицах $\Delta_0 = z|I|$. Обращает на себя внимание наличие логарифма в зависимости $\Delta(W)$ около критического разброса W_{c0} , обусловленного наличием резонирующих уровней [18]. В рамках нашего подхода последнее отражается зависимостью эффективного потенциала взаимодействия V от спектра системы ϵ_l [5].

Характерной особенностью зависимости $E(W, n)$ сдвига химического потенциала из центра зоны (рис. 1, *b*) является монотонное увеличение с ростом разброса уровней W и концентрации n , причем в области делокализации, ограниченной линией $W_c(n)$, зависимость $E(n)$ при $W = \text{const}$ является практически прямо пропорциональной, а при $\Delta = 0$ скорость ее нарастания увеличивается с n и W (рис. 2, *b*). В аналитическом виде имеем

$$E = n(1 + W^2/2) \quad \text{при } W \ll W_c,$$

$$n = \alpha \ln(1 + \alpha^{-1}) - \alpha^{-1} \ln(1 + \alpha) \quad \text{при } W \geq W_c, \quad (12)$$

где $\alpha = \exp(2E/W)$. Заметим, что второе из этих равенств является точным.

Кроме логарифмической поправки (10) наличие резонирующих уровней проявляется в немонотонном спадании плотности состояний $g = (2/\pi)\eta$, при определении которой фиксируется не концентрация n , а положение химического потенциала E (рис. 2, *a*). Характерно, что эта немонотонность проявляется только вдали от центра зоны, что приводит к наличию максимума на зависимости $E_c(W)$ ширины зоны делокализованных состояний (пунктирная линия на рис. 2, *a*). Аналитический

² Поскольку потенциал V также зависит от величин W, E [5], то плотность делокализованных состояний пропорциональна именно параметру порядка η , но не ширине щели $|\Delta|$.

³ При двойной логарифмической точности в формулах (11), (15) следует произвести замену $\ln(1 - n)^{-1}$ на $\ln[(1 - n)^{-1} \ln(1 - n)^{-1}]$.

вид указанных зависимостей определяется предельными соотношениями

$$\begin{cases} \eta^2 = (1 - E^2) - W^2/2 & \text{при } W \ll 1, \\ \left(\frac{\eta}{0.903}\right)^2 \ln\left(\frac{\eta}{0.903}\right) = \frac{W - W_{c0}}{W_{c0}} & \text{при } W_{c0} - W \ll W_{c0}, E = 0; \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} E_c = 1 + W^2/4 & \text{при } W \ll 1, \\ E_c = 2^{-1/2} W_{c0}^2 \left(1 - \frac{W}{W_{c0}}\right)^{1/2} = 1.277 \left(1 - \frac{W}{W_{c0}}\right)^{1/2} & \text{при } W_{c0} - W \ll W_{c0}. \end{cases} \quad (14)$$

Разумеется, само положение химического потенциала E не является свободным параметром, а задается величинами W , n согласно зависимостям, приведенным на рис. 1, b ; 2, b . Из последнего, в частности, видно, что переход от практически прямо пропорциональных зависимостей $E(n)$, присущих делокализованному состоянию, к кривым в локализованной области, обладающим заметной нелинейностью, осуществляется по штриховой линии зависимости $E_0(n)$, определяющей значения энергии, начиная с которого при заданной концентрации n образуется делокализованное состояние. Согласно рис. 2, b , кривая $E_0(n)$ имеет выпуклый вид с монотонным нарастанием энергии при всех значениях концентрации, исключая область $n \lesssim 1$. В аналитическом виде с логарифмической точностью имеем

$$E_0 = bn, \quad b = \sqrt{\ln(\pi/2)/(\ln 4 - 1)} = 1.739 \quad \text{при } n \ll 1,$$

$$E_0 = 1 + |\ln(1 - n)|^{-2} \quad \text{при } n \ll 1. \quad (15)$$

3. Коллективные возбуждения

Согласно [5], процесс делокализации обусловлен тем, что при сближении уровней ε_l соседних узлов они образуют связанную пару, отвечающую коллективному возбуждению бозевого типа. Если число таких пар N составляет конечную часть $N/N_0 = \eta^2/2$ от полного числа узлов N_0 , то процесс делокализации приобретает макроскопический характер и определяется параметром дальнего порядка $\eta = |\Delta|/V$. Как уже указывалось в разделе 2, в представлении одиночных возбуждений делокализация проявляется в появлении недиагональных составляющих $\propto |\Delta|$ в матрице собственно энергетической функции $\hat{\Sigma}$. Соответственно функция Грина коллективных возбуждений $\hat{\Gamma}(\mathbf{K}, \Omega)$ приобретает конденсатную составляющую

$$\hat{\Gamma}(\mathbf{K}, \Omega_S) = (N_0/W) \hat{\Gamma}_0 \delta_{\mathbf{K}\mathbf{0}} \delta_{S0}, \quad \hat{\Gamma}_0 = - \begin{pmatrix} |\Delta|^2 & \Delta^2 \\ (\Delta^*)^2 & |\Delta|^2 \end{pmatrix}, \quad (16)$$

которая в отличие от флуктуационной $\hat{\Gamma}'(\mathbf{K}, \Omega)$ принимает в статическом пределе $\Omega = 0$ конечное значение, определяемое шириной щели Δ . Подставляя (16) во временное фурье-преобразование уравнения (2b) и переходя к мадубаровской частоте ω_s , после обращения матрицы

(2а) получаем, как и следовало ожидать, выражения (8) для компонент функции Грина $\hat{G}_l(\omega_s)$ и энергетического спектра ϵ_l . Подставляя их в фурье-образ уравнения (2d) и проводя суммирование по частотам, из (2с) находим

$$\hat{\Gamma}_0^{-1} = \begin{pmatrix} B - A|\Delta|^2 & A\Delta^2 \\ A(\Delta^*)^2 & B - A|\Delta|^2 \end{pmatrix},$$

$$A \equiv N_0^{-1} \sum_l \frac{1}{2\epsilon_l^3} \text{th} \frac{\epsilon_l}{W}, \quad B \equiv V^{-1} + N_0^{-1} \sum_l \epsilon_l^{-1} \text{th} \frac{\epsilon_l}{W}. \quad (17)$$

Обращая матрицу $\hat{\Gamma}_0^{-1}$, в пределе $B \rightarrow 0$ получаем постулированное выражение (16) при условии $B = -W/2N_0|\Delta|^2$. Отсюда в термодинамическом пределе $N_0 \rightarrow \infty$ находим равенство $B = 0$, которое с учетом последнего соотношения (17) и определения эффективного потенциала \hat{V} приводит, как и следовало ожидать, к уравнению (7) для щели $|\Delta|$.

Гидродинамическое выражение ($\mathbf{K}, \Omega \rightarrow 0$) для флуктуирующей составляющей $\hat{G}'(\mathbf{K}, \Omega)$ вершинной функции наиболее просто определить методом, развитым в [6,7]. Его суть состоит в том, что вместо точного уравнения $\hat{G}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \Delta_0 \hat{\delta}$, $\Delta_0 = zI$ для функции Грина \hat{G} используется его аналог $\langle \hat{G} \rangle^{-1} = \hat{\sigma}^{-1} - \Delta_0 \hat{\delta}$ для усредненной по разбросу уровней функции $\langle \hat{G} \rangle$ и локатора $\hat{\sigma} = \langle \hat{G}_0 \rangle$. Кроме того, вводится эффективный интерактор $\hat{U} = \Delta_0 \hat{\delta} + \Delta_0^2 \langle \hat{G} \rangle$, который в отличие от использованного выше потенциала \hat{V} содержит слагаемое первого порядка по интегралу перекрытия I . При этом уравнение Дайсона, заменяющее (2а), принимает вид $\hat{U}^{-1} = \Delta_0^{-1} \hat{\delta} - \hat{\sigma}$. Двухчастичная функция Грина [6-10]

$$\varphi(E; \mathbf{K}, \Omega) = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle G^R(\mathbf{k}_+, \mathbf{k}'_+; E + \Omega) G^A(\mathbf{k}_-, \mathbf{k}'_-; E) \rangle \quad (18)$$

имеет в лестничном приближении вид (ср. с (2с))

$$\varphi(E; \mathbf{K}, \Omega) = -\frac{1}{2\pi i} \left[\gamma^{-1} - \sum_{\mathbf{k}} U^R(\mathbf{k}_+, E + \Omega) U^A(\mathbf{k}_-, E) \right]^{-1}, \quad (19)$$

где $\mathbf{k}_{\pm} = \mathbf{k} \pm \mathbf{K}/2$, γ — неприводимая четыреххвостка, индексы R, A запаздывающей и опережающей функций отвечают выбору компонент $\alpha = 1, 2$ из разных подпространств состояний системы. Отсюда, учитывая уравнение Дайсона и тождество Уорда [6]

$$\sigma_{\mathbf{k}_+}^R(E + \Omega) - \sigma_{\mathbf{k}_-}^A(E) = \gamma \sum_{\mathbf{k}'} \left[U_{\mathbf{k}'_+}^R(E + \Omega) - U_{\mathbf{k}'_-}^A(E) \right] - \tilde{\gamma} \Omega, \quad (20)$$

где неприводимая вершина $\tilde{\gamma}$ имеет в отличие от γ два совпадающих хвоста, отвечающих одинаковым узлам, приходим к обычному выражению для флуктуационной составляющей двухчастичной функции Грина [6-10]

$$\varphi'(\mathbf{K}, \Omega) = -\frac{\chi(\mathbf{K})}{\Omega + iD(\mathbf{K}, \Omega)K^2}, \quad (21)$$

где $\chi(\mathbf{K})$ — термодинамическая восприимчивость, равная в гидродинамическом пределе $\mathbf{K} = 0$ плотности состояний $g(E)$ на уровне E , $D(\mathbf{K}, \Omega)$ — диспергирующий коэффициент диффузии, принимающий при $\mathbf{K} = 0$ значение [6]

$$D = \frac{1}{\pi g} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{k}{m} \text{Im} \langle G_{\mathbf{k}}^A \rangle \right)^2, \quad (22)$$

где k — проекция \mathbf{k} на \mathbf{K} , m — масса частицы. В результате для флуктуирующей составляющей вершинной функции $\Gamma'(\mathbf{K}, \Omega) = -2\pi i \varphi'(\mathbf{K}, \Omega)$ [6,7] получаем

$$\left(\hat{\Gamma}(\mathbf{K}, \Omega) \right)^{-1} = \frac{1}{2\pi g} \begin{pmatrix} -i\Omega + DK^2 & 0 \\ 0 & i\Omega + DK^2 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

где матричная структура отражает наличие двух полюсов $\Omega = \mp iDK^2$.

Сумма выражений (17), где $B = 0$, и (23) дает полную функцию Грина коллективных возбуждений:

$$\varphi(\mathbf{K}, \Omega) = \frac{g}{D(\mathbf{K}, \Omega)} \begin{pmatrix} -\Omega - i((1/2)SK_0 - DK^2) & -(i/2)(\Delta/|\Delta|)^2 SK_0 \\ -(i/2)(\Delta^*/|\Delta|)^2 SK_0 & \Omega - i((1/2)SK_0 - DK^2) \end{pmatrix}, \quad (24a)$$

$$D(\mathbf{K}, \Omega) = \Omega^2 + ((1/2)SK_0 - DK^2)^2 - (1/4)S^2K_0^2, \quad (24b)$$

$$S^2 = 4\pi g A |\Delta|^2 D, \quad (24c)$$

$$K_0^2 = 4\pi g A |\Delta|^2 / D. \quad (24d)$$

Условие $D(\mathbf{K}, \Omega) = 0$ приводит к закону дисперсии

$$\Omega = \pm DK \sqrt{K_0^2 - K^2}. \quad (25)$$

Как видно из рис. 3, его характерная особенность состоит в том, что коллективная мода имеет реактивный характер в длинноволновой

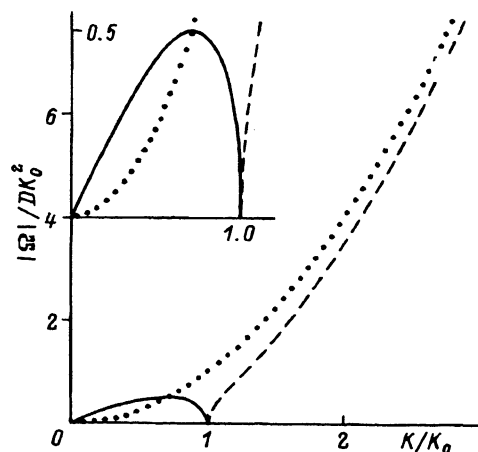


Рис. 3. Закон дисперсии коллективной моды.

Сплошная линия отвечает действительному значению частоты, штриховая — мнимому; пунктирная — диффузионной моде.

области $K < K_0$, ограниченной волновым числом (24d), и релаксационный в коротковолновой $K > K_0$. При $K \gg K_0$ получаем, как следовало ожидать, обычную диффузионную моду $\Omega = \mp iDK^2$.

Таким образом, самосогласованное рассмотрение одиночных и коллективных возбуждений приводит к выводу, что кроме диффузионного режима, реализуемого в мезоскопической области $K > K_0$, в системе возможно распространение колебаний, характеризуемых фазовой скоростью S , определяемой равенством (24с). Закон дисперсии (25), приобретающий акустический вид в предельно длинноволновой области $K \ll K_0$, отвечает колебаниям плотности делокализованных фермионов, т.е. звуку. Разумеется, если фермионы несут заряд e , как это имеет место для электронов, то обусловленное кулоновским взаимодействием время релаксации $\tau = (m/4\pi\rho)^{1/2}e^{-1}$ оказывается намного меньше обратного значения Ω_0^{-1} характерной частоты звука $\Omega_0 = SK_0$. Поэтому проявления данной моды можно ожидать только для незаряженных фермионов типа атомов He³.

Такая ситуация реализуется в квантовых кристаллах [15], где найденная звуковая мода обусловлена нулевыми колебаниями. При этом полуширина разброса уровней $W/2$ сводится к реальной температуре T (вследствие малости температуры вырождения $T_F \propto \rho^{2/3}/m$ квантовых кристаллов $T \ll 1$), концентрация n локализованных атомов определяет значение параметра квантовой дилатации $\delta = 1 - n$, плотность фермионов $\rho = N_0/V$ задает величину интеграла перекрытия $I \propto \exp(-\text{const}\rho^{-1/3})$, определяющего параметр типа де Бюра. Вид температурной зависимости $\Omega_0(T)$ характерной частоты звука при фиксированных значениях δ показан на рис. 4. В целом она повторяет вид соответствующей зависимости $|\Delta|(W)$ ширины щели (рис. 1,а). Исключением является поведение вблизи критической температуры делокализации T_c , где корневая особенность $|\Delta|(W)$ трансформируется в линейную $\Omega_0 \propto T_c - T$. Поскольку сам коэффициент диффузии $D(W)$

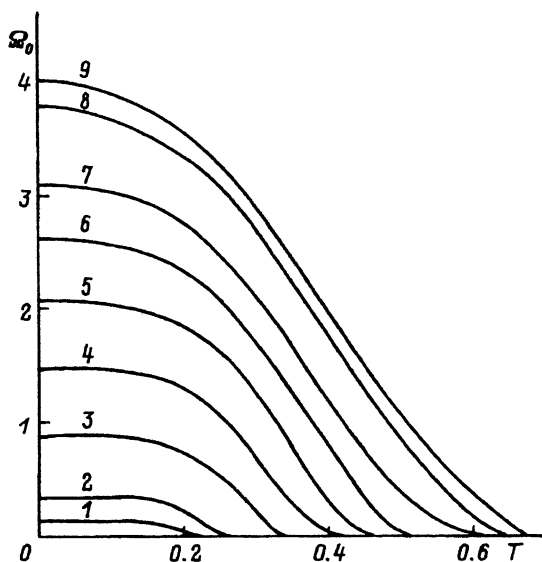


Рис. 4. Температурная зависимость характерной частоты нулевых колебаний.

Значения параметров квантовой дилатации δ : 1 — 0.05, 2 — 0.1, 3 — 0.2, 4 — 0.3, 5 — 0.4, 6 — 0.5, 7 — 0.6, 8 — 0.8, 9 — 1.0.

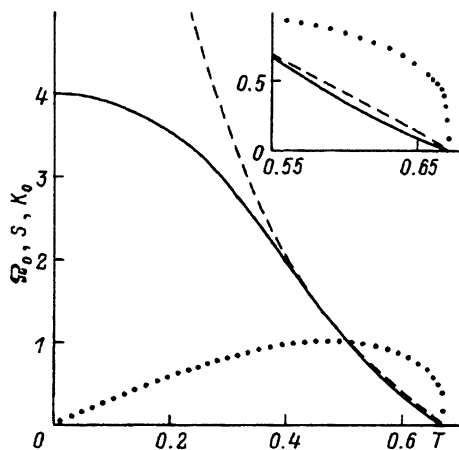


Рис. 5. Температурная зависимость характерной частоты Ω_0 звуковой моды (сплошная линия), фазовой скорости S (штриховая линия) и граничного значения волнового числа K_0 (пунктирная линия) при квантовой дилатации $\delta = 1$.

ведет себя в критической области корневым образом [10], то это означает наличие особенностей $S \propto (T_c - T)^{3/4}$ для скорости звука (24с) и $K_0 \propto (T_c - T)^{1/4}$ для граничного волнового числа (24д). В актуальном для квантовых кристаллов пределе слабой связи $T \ll T_c$ формулы (24с,д), (10), (17) приводят к результату $\Omega_0 = 4$. Тогда, учитывая, что коэффициент диффузии расходуется здесь согласно соотношению $D \propto T^{-2}$ [10], видим, что скорость звука $S \propto T^{-1}$ также неограниченно возрастает, а граничное значение волнового вектора $K_0 \propto T$ наоборот уменьшается. На рис. 5 приведен вид температурных зависимостей величин Ω_0 , S , K_0 во всем интервале $0 \geq T \geq T_{c0}$ при $\delta = 1$ (температурная зависимость коэффициента диффузии взята из работы [10]). Видно, что при $T \ll T_{c0}$ закон дисперсии звуковой моды, имеющий вид колокола с пологой длинноволновой стороной (рис. 3), реализуется в узком интервале значений $K < K_0$ и широком частотном интервале $\Omega < \Omega_0/2$ (при этом скорость S очень велика). С ростом температуры частотный интервал $\Omega_0/2$ и скорость S монотонно спадают, а ширина колокола K_0 сначала нарастает, а затем быстро спадает (рис. 5). Отсюда следует, что наиболее предпочтительной (в смысле обнаружения моды нулевого звука) является область температур в интервале $0 < T < \min(T_F, T_m, T_c)$, верхняя граница которого задается наименьшим значением температур вырождения T_F , плавления T_m или критического значения T_c . Вместе с тем следует иметь в виду, что теория Ландау, учитывающая взаимодействие фермионов, предсказывает существование моды нулевого звука лишь в области предельно больших частот Ω [14]. С учетом спадающего характера зависимости $\Omega_0(T)$ на рис. 4 это означает, что появления нулевого звука следует ожидать в предельно низкотемпературной области ($T \ll \min(T_F, T_m, T_c)$) при квантовой дилатации $\delta = 1$.

Пользуясь случаем, выражаем благодарность рецензенту, замечания которого способствовали прояснению физического смысла обсуждаемых явлений.

Список литературы

- [1] Anderson P.W. Phys. Rev. **18**, 5, 1492 (1958).
- [2] Edwards S.F. Phil. Mag. **3**, 1020 (1958).
- [3] Mott S.N. J. Phys. C: Solid State Phys. **20**, 3075 (1987).
- [4] Олемской А.И. ФТТ. **23**, 11, 3442 (1981).
- [5] Olemskoi A.I. Phys. Stat. Sol. (b) **160**, 2, 569 (1990).
- [6] Kopp T. J. Phys. C: Solid State Phys. **17**, 11, 1897; 1919 (1984).
- [7] Vollhardt D., Wölfle P. Phys. Rev. **B22**, 10, 4666 (1980).
- [8] Altshuler B.L., Aronov A.G., Khmel'nitskii D.E., Larkin A.I. // Quantum theory of Solids / Ed. I.M. Lifshits M. (1982), P. 130.
- [9] Гетзе В. Фазовые переходы жидкость-стекло. М. (1992), 192 с.
- [10] Götze W. Phil. Mag. B **43**, 2, 219 (1981).
- [11] Palmer R.G. Adv. Phys. **31**, 6, 669 (1982).
- [12] Гинзбург С.Л. Необратимые явления в спиновых стеклах. М. (1989), 152 с.
- [13] Hausmann R. Z. Phys. B **91**, 291 (1993).
- [14] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М. (1962), 444 с.
- [15] Андреев А.Ф., Лифшиц И.М. ЖЭТФ **56**, 6, 2057 (1969).
- [16] Crisanti A., Paladin G., Sommers H.-J., Vulpiani A. J. Phys. France **2**, 1325 (1992).
- [17] Mezard M., Parisi G., Virasoro M.A. Spain Glass Theory and Beyond. Singapore (1988).
- [18] Mott N.F. Phil. Mag. **22**, 7 (1970).