О статистической проводимости неупорядоченной зеркально-симметричной квантовой системы

© А.Г. Моисеев

Новосибирский государственный технический университет,
630092 Новосибирск, Россия

(Получена 23 марта 1999 г. Принята к печати 13 октября 1999 г.)

Исследуется низкочастотная ветвь проводимости неупорядоченной зеркально-симметричной квантовой системы. Система описывается гамильтонианом Хаббарда. Число электронов равно числу узлов. Показано, что при сильном притяжении электронов на одном узле и сильном отталкивании электронов на соседних узлах проводимость возрастает при увеличении длины системы, когда $T = 0\,\mathrm{K}$. Показано, что переход металл–диэлектрик в такой системе не имеет места.

Как отмечено в [1], одномерная неупорядоченная система при $T \to 0\,\mathrm{K}$ испытывает переход металл–диэлектрик. По мнению автора, такой переход при $T \to 0\,\mathrm{K}$ не является универсальным свойством одномерной неупорядоченной системы. Так, низкочастотная ветвь проводимости неупорядоченной зеркально-симметричной системы при сильном притяжении электронов на одном узле и сильном отталкивании электронов на соседних узлах расходится с увеличением длины системы, когда $T \to 0\,\mathrm{K}$, при условии, что число электронов равно числу узлов. Переход металл–диэлектрик при $T \to 0\,\mathrm{K}$ в такой системе не имеет места. Проводимость одномерной неупорядоченной зеркально-симметричной системы исследовалась в работах [2,3]. В статье [2] проводимость исследовалась в приближении невзаимодействующих электронов. Было обнаружено, что в неограниченной среде электрон за бесконечно большое время может переходить из области, лежащей в $-\infty$, в область, лежащую в $+\infty$. Это поведение электрона отличает неупорядоченную зеркально-симметричную систему от неупорядоченной пространственно однородной в среднем системы [4], в которой электрон не может уходить на бесконечность. Статическая же проводимость неупорядоченной системы [2] при $T \to 0\,\mathrm{K}$ обращается в нуль. В работе [3] исследовалась проводимость неупорядоченной зеркально-симметричной системы, когда число электронов равно числу узлов, а между электронами, находящимися на одном узле, существует сильное отталкивание. В этом случае статическая проводимость также равна нулю и система является диэлектриком. Однако при определенной частоте внешнего поля проводимость расходится.

В настоящей работе исследуется проводимость неупорядоченной зеркально-симметричной системы, когда число электронов равно числу узлов. При этом между электронами на одном узле существует сильное притяжение, а между электронами на соседних узлах — сильное отталкивание. В качестве модельного гамильтониана выбирается гамильтониан Хаббарда

$$\begin{aligned}
\hat{H} = {} & \sum_{n=1}^{n=N} \varepsilon_n \big(\hat{c}^+_{n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow} + \hat{c}^+_{n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow} + \hat{c}^+_{-n;\uparrow}\hat{c}_{-n;\uparrow} \\
& + \hat{c}^+_{-n;\downarrow}\hat{c}_{-n;\downarrow} \big) - |U| \sum_{n=-N}^{n=N} \hat{c}^+_{n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow}\hat{c}^+_{n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow} \\
& + |\bar{U}| \sum_{n=1}^{n=N-1} \big(\hat{c}^+_{n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow}\hat{c}^+_{n+1;\uparrow}\hat{c}_{n+1;\uparrow} + \hat{c}^+_{n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow}\hat{c}^+_{n+1;\downarrow}\hat{c}_{n+1;\downarrow} \\
& + \hat{c}^+_{n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow}\hat{c}^+_{n+1;\uparrow}\hat{c}_{n+1;\uparrow} + \hat{c}^+_{n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow}\hat{c}^+_{n+1;\downarrow}\hat{c}_{n+1;\downarrow} \big) \\
& + \sum_{n=1}^{n=N} t_n \big(\hat{c}^+_{n;\uparrow}\hat{c}_{-n;\uparrow} + \hat{c}^+_{n;\downarrow}\hat{c}_{-n;\downarrow} + \hat{c}^+_{-n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow} + \hat{c}^+_{-n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow} \big). \qquad (1)
\end{aligned}$$

Здесь все ε_n отрицательны и случайны; $2N$ — число узлов; N — четное число; $t_n = \Delta\exp(-a a_n)$; a — межузельное расстояние; n — номер узла; $a_n = a(n-0.5)$ — координата узла n ($n \geqslant 1$). В модельном гамильтониане (1) учитываются переходы только между зеркально-симметричными узлами $(n; -n)$, параметры ε_n для которых равны между собой: $\varepsilon_n = \varepsilon_{-n}$.

Сильное притяжение электронов на одном узле и отталкивание на соседних узлах приводит к тому, что электроны объединяются в пары, по два электрона с противоположными спинами на один узел, при условии, что между парами находится по одному пустому углу. Тогда для расчета односного и первого возбужденного состояний при выполнении условий $t \ll \Delta\varepsilon \ll |U| \approx |\bar{U}|$ ($\Delta\varepsilon$ — разброс величин ε_n) выбираются базисные векторы $|1\rangle$ и $|2\rangle$:

$$\begin{cases}
|1\rangle = \Big| \begin{matrix} 0 & \updownarrow & \ldots & \updownarrow & 0 & \updownarrow & 0 & \updownarrow & 0 & \ldots & 0 & \updownarrow \\ -N; & -N+1; & \ldots & -3; & -2; & -1; & 1; & 2; & 3; & \ldots & N-1; & N \end{matrix} \Big\rangle, \\
|2\rangle = \Big| \begin{matrix} \updownarrow & 0 & \ldots & 0 & \updownarrow & 0 & \updownarrow & 0 & \updownarrow & \ldots & \updownarrow & 0 \\ -N; & -N+1; & \ldots & -3; & -2; & -1; & 1; & 2; & 3; & \ldots & N-1; & N \end{matrix} \Big\rangle.
\end{cases} \qquad (2)$$

Здесь стрелками указано направление спинов, а цифрами — номера узлов. Чтобы построить основное и первое возбужденное состояния из векторов $|1\rangle$ и $|2\rangle$, введем эффективный гамильтониан $\hat{H}_0$, представитель которого в базисе $|1\rangle$ и $|2\rangle$ имеет вид

$$\langle 1|\hat{H}_0|1\rangle = \langle 2|\hat{H}_0|2\rangle = \varepsilon_0; \quad \langle 2|\hat{H}_0|1\rangle = -|A|.$$

Тогда собственные векторы и собственные значения эффективного гамильтониана $\hat{H}_0$ имеют вид

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = (|1\rangle + |2\rangle)/\sqrt{2}, & \varepsilon_1 = \varepsilon_0 - |A|, \\ |\psi_2\rangle = (|1\rangle - |2\rangle)/\sqrt{2}, & \varepsilon_2 = \varepsilon_0 + |A|. \end{cases} \tag{3}$$

Анализ проводимости исследуемой системы требует расчета амплитуды перехода $\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle$ состояния $|1\rangle$ в $|2\rangle$ и частоты перехода

$$\bar{\omega}_0 = 2|A|/\hbar = \frac{2|\langle 2|\hat{H}_0|1\rangle|}{\hbar}$$

между состояниями $|\psi_1\rangle$ и $|\psi_2\rangle$. (Здесь $\hat{U}(t')$ — оператор эволюции). Модельный гамильтониан (1) удобно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}' + \hat{V}, \tag{4}$$

где оператор $\hat{V}$ описывает переходы электронов между зеркально-симметричыми узлами.

$$\hat{V} = \sum_{n=1}^{N} t_n \left(\hat{c}^{+}_{n;\uparrow}\hat{c}_{-n;\uparrow} + \hat{c}^{+}_{n;\downarrow}\hat{c}_{-n;\downarrow} + \hat{c}^{+}_{-n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow} + \hat{c}^{+}_{-n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow}\right). \tag{5}$$

Теперь оператор эволюции в представлении взаимодействия может быть записан в виде

$$\hat{U}(t') = \exp(-i\hat{V}t'/\hbar). \tag{6}$$

Амплитуда перехода $\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle$ отлична от нуля только в $2N$-порядке теории возмущения и равна

$$\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle = \langle 2|\frac{1}{(2N)!}\left(-\frac{i\hat{V}t'}{\hbar}\right)^{2N}|1\rangle$$

$$= \prod_{n=1}^{n=N}\left\{-\left[\Delta^2(t')^2\exp(-2aa_n)\right]/\hbar^2\right\}. \tag{7}$$

Произведение экспонент (7) можно представить как экспоненту, у которой аргумент есть сумма

$$\sum_{n=1}^{n=M}(-2aa_n).$$

Эта сумма при четном N может быть вычислена как сумма ряда арифметической прогрессии

$$\sum_{n=1}^{n=N}(-2aa_n) = -aaN^2,$$

что позволяет представить амплитуду перехода $\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle$ в виде

$$\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle = \left(\frac{\Delta t'}{\hbar}\right)^{2N}\exp(-aaN^2). \tag{8}$$

Анализ формулы (8) для амплитуды перехода $\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle$ показывает, что при $N \to \infty$ эта амплитуда стремится к нулю при малом t' ($\Delta t'/\hbar < 1$):

$$\lim\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle = 0 \quad \text{при} \quad N \to \infty.$$

Недиагональный элемент $\langle 2|\hat{H}_0|1\rangle$ гамильтоновой матрицы, а следовательно, и частота перехода $\bar{\omega}_0 = 2|\langle 2|\hat{H}_0|1\rangle|/\hbar$ могут быть оценены из условия

$$\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle 2|\hat{H}_0|1\rangle t', \tag{9}$$

когда t' мало. Поскольку, согласно (8), амплитуда перехода $\langle 2|\hat{U}(t')|1\rangle$ для малого t' стремится к нулю при $N \to \infty$ быстрее, чем $\exp(-aaN^2)$, то, согласно (9), матричный элемент $\langle 2|\hat{H}_0|1\rangle$ также стремится к нулю при $N \to \infty$ быстрее, чем $\exp(-aaN^2)$. Это дает возможность утверждать, что частота перехода $\bar{\omega}_0$ в длинной системе (N — велико) ограничена экспоненциально малой величиной

$$\bar{\omega}_0 < \Omega\exp(-aaN^2). \tag{10}$$

При проведении вычислений состояние $|\psi_1\rangle$ будем считать стационарным состоянием с энергией $E_1 = \varepsilon_0 - |A|$, а состояние $|\psi_2\rangle$ будем считать состоянием с конечным временем жизни τ. Энергия состояния E_2 есть комплексная величина

$$E_2 = \varepsilon_0 + |A| + i\Gamma. \tag{11}$$

Мнимая часть энергии Γ связана со временем жизни τ следующими образом:

$$\frac{\Gamma}{\hbar} = \bar{\Gamma} = -\frac{1}{\tau}. \tag{12}$$

Конечное время жизни τ может быть объяснено естественной шириной уровня, обусловленной спонтанным излучением фотона при переходе системы из состояния $|\psi_2\rangle$ в состояние $|\psi_1\rangle$ [5].

$$\frac{1}{\tau} = \frac{4}{3}\frac{\bar{\omega}_0^3}{\hbar c^3}\left|\langle\psi_2|\hat{d}|\psi_1\rangle\right|^2, \tag{13}$$

где $\hat{d}$ — оператор дипольного момента

$$\hat{d} = q_e\sum_{1}^{N} a_n\left(\hat{c}^{+}_{n;\uparrow}\hat{c}_{n;\uparrow} + \hat{c}^{+}_{n;\downarrow}\hat{c}_{n;\downarrow} - \hat{c}^{+}_{-n;\uparrow}\hat{c}_{-n;\uparrow} - \hat{c}^{+}_{-n;\downarrow}\hat{c}_{-n;\downarrow}\right).$$

Для расчета проводимости введем гамильтониан $\hat{W}(t)$, описывающий воздействие внешнего электрического поля на неупорядоченную систему

$$\hat{W}(t) = 0 \quad (t < 0); \quad \hat{W}(t) = \hat{W}_E\cos(\omega t) \quad (t > 0), \tag{14}$$

где $\hat{W}_E = -E_0\hat{d}$, E_0 — проекция напряженности электрического поля на ось системы. Вектор состояния системы $|\psi(t)\rangle$ представляется в виде

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_1\rangle \exp\Big(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\Big) C_1(t) + |\psi_2\rangle \exp\Big(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\Big) C_2(t). \qquad (15)$$

Амплитуды $C_1(t), C_2(t)$ могут быть рассчитаны методом теории возмущения при заданном начальном условии $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_1\rangle$:

$$C_1(t) = 1,\ C_2(t) = \frac{\langle\psi_2|\hat{W}_E|\psi_1\rangle}{2\hbar} \frac{[1 - \exp i(\omega_0 - \omega)t]}{(\omega_0 - \omega)}. \qquad (16)$$

Здесь $\omega_0 = \hat{\omega}_0 + i\hat{\Gamma}$. Выражения для $C_1(t), C_2(t)$ позволяют рассчитать среднее значение координат электронов $\hat{X}(t)$:

$$\hat{X}(t) = \langle\psi(t)|\hat{X}|\psi(t)\rangle, \qquad (17)$$

где $\hat{X} = \frac{1}{2Nq_e}\hat{d}$ — оператор среднего значения координат электронов неупорядоченной системы. С учетом выражения для $C_2(t)$ формула для $\bar{X}(t)$ имеет вид

$$\bar{X}(t) = \frac{aW_{21}}{4\hbar} \frac{[\exp(-i\omega_0 t) - \exp(-i\omega t)]}{\omega_0 - \omega} + \text{к.с.} \qquad (18)$$

В установившемся режиме $(t \to \infty)$ $\bar{X}(t)$ равно

$$\bar{X}(t) = \frac{aW_{21}}{2\hbar} \frac{(\omega - \bar{\omega}_0)\cos(\omega t) + \bar{\Gamma}\sin(\omega t)}{(\bar{\omega}_0 - \omega)^2 + \Gamma^2}, \qquad (19)$$

где $W_{21} = \langle\psi_2|\hat{W}_E|\psi_1| = -q_e E_0 aN$. Скорость электрона есть $\dot{\bar{X}}(t)$, а плотность электрического тока $J(t)$ при резонанасе $(\omega = \bar{\omega}_0)$ в установившемся режиме $(t \to \infty)$ имеет вид

$$J(t) = -E_0 \frac{q_e^2}{\hbar} aN \frac{\bar{\omega}}{\bar{\Gamma}} \cos(\bar{\omega}_o t) = E_0 \sigma_0 \cos(\bar{\omega}_0 t). \qquad (20)$$

С учетом выражений (12), (13) для $\bar{\Gamma}$ резонансная проводимость σ_0 равна

$$\sigma_0 = \frac{3}{8}\frac{c^3}{Na\bar{\omega}_0^2} = \frac{3}{4}\frac{c^3}{L\bar{\omega}_0^2}, \qquad (21)$$

где $L = 2aN$ — длина системы.

Полученная формула (21) для σ_0 и оценочная формула (10) для $\bar{\omega}_0$ дает возможность утверждать, что в очень длинной системе (N — велико) резонансная проводимость σ_0 возрастает с увеличением N быстрее, чем величина $\frac{1}{N}\exp(2a\alpha N^2)$.

Таким образом, в исследуемой неупорядоченной зеркально-симметричной системе переход металл–диэлектрик при $T \to 0\,\text{K}$ не имеет места.

Автор глубоко благодарит М.В. Энтина за внимание к работе и обсуждение результатов.

Список литературы

[1] А.А. Абрикосов. *Основы теории металлов* (М., Наука, 1987).
[2] А.Г. Моисеев, М.В. Энтин. ФТП, **28**, 1282 (1994).
[3] А.Г. Моисеев. ФТП, **30**, 2127 (1996).
[4] В.Л. Березинский. ЖЭТФ, **65**, 125 (1973).
[5] Э. Ферми. *Ядерная физика* (М., ИИЛ, 1951).

Редактор Т.А. Полянская

On static conductivity of a disordered mirror-symmetrical quantum system

A.G. Moiseev

Novosibirst State Technical University,
63009 Novosibirsk, Russia

Abstract The low frequency branch of conductivity of a disordered quantum system with a mirror symmetry is considered. The system is described by the Hubbard Hamiltonian, the number of electrons being equal to the number of modes. It is shown that in the case of strong one-node attraction and strong repulsion between electrons on neighbouring nodes the conductivity at $T = 0\,\text{K}$ increases with the increase of the system length. The metal-insulator transition in such a system is shown not to exist.