

ПРОВОДИМОСТЬ ЭЛЕКТРОНОВ В НЕСОИЗМЕРИМЫХ СИСТЕМАХ ВБЛИЗИ ПОРОГА ЛОКАЛИЗАЦИИ

И. М. Сулов

Рассматривается система невзаимодействующих электронов, движущихся в поле двух периодических потенциалов с несоизмеримыми периодами. При некотором значении потенциала V_c в такой системе происходит переход Андерсона. Проводимость конечного образца (длиной L) $\sigma(L) \propto \exp(-L/\xi)$ в области локализованных состояний ($V > V_c$) и $\sigma(L) \propto L$ в металлической фазе ($V < V_c$). Величина $g = \sigma(L)/L$, $L \rightarrow \infty$, т. е. полная (не удельная) проводимость макроскопического образца, обращается в нуль в точке перехода скачком при $T=0$ и линейно при конечной температуре.

Введение

В настоящей работе, которая является непосредственным продолжением предыдущей [1], рассматривается задача о движении электрона в поле двух периодических потенциалов с несоизмеримыми периодами (отношение периодов иррационально). Эта задача представляет интерес как для понимания свойств несоизмеримых систем [2, 3], так и для понимания эффектов локализации в неупорядоченных системах [4].

В недавних работах [5–7] приведены аргументы, подтверждаемые численными экспериментами, в пользу того, что для простейшей модели, описываемой уравнением сильной связи с периодической модуляцией уровней:

$$a_{l+1} + a_{l-1} + V \cos(2\pi\beta l) a_l = E a_l, \quad (1)$$

где β — иррациональный параметр, значение потенциала $V=2$ является точкой перехода Андерсона: при $V > 2$ все собственные функции уравнения (1) локализованы, а при $V < 2$ — делокализованы. С другой стороны, в работе Азбеля [3] показано, что спектр несоизмеримой системы имеет характер «чертовой лестницы», и дан метод вычисления этого спектра для таких чисел β , в разложении которых в ценную дробь

$$\beta = \frac{1}{n_1 + \beta_1} = \frac{1}{n_1 + \frac{1}{n_2 + \beta_2}} = \dots = \frac{1}{n_1 + \frac{1}{n_2 + \frac{1}{n_3 + \dots}}} \quad (2)$$

все $\beta, \beta_1, \beta_2, \dots$ оказываются малыми.

В предыдущей работе автора [1] путем некоторой модификации метода Азбеля [3] получен алгоритм построения волновых функций несоизмеримой системы для $\beta, \beta_1, \beta_2, \dots \ll 1$ и последовательным образом показано существование для уравнения (1) перехода Андерсона при $V=2$. В этом подходе естественным образом возникает однопараметрический скейлинг, близкий к предложенному в [8] для неупорядоченных систем. Кроме того, в [1] показано, что описание несоизмеримой системы общего вида вблизи порога локализации сводится к уравнению (1).

В связи с большим интересом, который в последнее время вызывает проводимость неупорядоченных систем вблизи перехода Андерсона, естественно рассмотреть аналогичную задачу для несоизмеримых систем. Не вызывает сомнений факт отсутствия статической проводимости при $T=0$ в области локализованных состояний ($V > 2$); имеющиеся же представле-

ния о проводимости металлической фазы носят довольно неопределенный и откровенно гипотетический характер. Соколовым [5] высказывалось предположение о непрерывном обращении проводимости в нуль при приближении к переходу. Азбель [3] подчеркивал неомический характер проводимости: закон Ома $R \propto L$ (L — длина образца) возможен только в среднем, в пренебрежении осциллирующей зависимостью от L , которая возникает из-за наличия чертовой лестницы.

Исследование проводимости несоизмеримых систем составляет основную цель настоящей работы. Соответствующие вычисления, проведенные для малых β_k , изложены в §§ 3, 4; для понимания их хода достаточно знакомства с физической картиной спектра и волновых функций, представленной в [1]. Однако построенной в [1] ренорм-группы недостаточно для целей настоящей работы, так как она неприменима в некоторых участках спектра (подробнее см. [1]), которые как раз в основном и определяют проводимость. Поэтому ниже, в § 1, предложен другой вариант ренорм-группы, который применим уже для всех состояний. Фактически результат состоит в том, что рассуждения работы [1] применимы ко всему спектру, несмотря на нарушение приближения сильной связи в некоторых его участках. Одновременно метод § 1 позволил рассмотреть произвольные иррациональные числа β (без предположения малости β_k). Выяснилось, что результаты работы [1] справедливы для всех иррациональных чисел, кроме их подмножества меры нуль, для которого локализация имеет место лишь в слабом смысле (§ 2).

§ 1. Ренорм-группа

1. Рассмотрим вспомогательное уравнение, получаемое из (1) после аппроксимации β рациональной дробью M/N , которую будем считать несократимой:

$$a_{l+1} + a_{l-1} + V \cos [2\pi(M/N)(l+\varphi)] a_l = E a_l, \quad (3)$$

где φ — постоянная фаза. Это уравнение описывает периодическую систему с периодом из N атомов, и его спектр состоит из N энергетических зон. Ниже будет показано, что законы дисперсии этих зон $\epsilon_s(p)$, p — квазиимпульс, зависящие от φ , как от параметра, имеют вид

$$\epsilon_s(p, \varphi) = f_s[\cos Np + V(N) \cos 2\pi M\varphi], \quad s=1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

где $f_s(x)$ является гладкой и монотонной функцией. В пределах применимости метода работы [1] функции $f_s(x)$ оказывались линейными, а коэффициент $V(N)$ играл роль скейлингового параметра при масштабных преобразованиях. Фактически предлагаемое здесь обобщение ренорм-группы состоит во введении функции $f_s(x)$ общего вида и сохранении $V(N)$ в качестве скейлингового параметра. Покажем, что такой выбор скейлингового параметра является физически правильным.

Положим в уравнении (1)

$$\beta l \equiv (M/N) [l + \varphi(l)], \quad (5)$$

после чего оно переходит в (3), но с переменной фазой $\varphi = \varphi(l)$. Свойства уравнения (3) с переменной $\varphi(l)$ можно выяснить, исходя из свойств этого уравнения с постоянной φ .

Разобьем рассматриваемую систему на блоки из N атомов в каждом. Движению внутри каждого отдельного блока соответствуют N энергетических уровней и волновые функции, локализованные внутри каждого отдельного блока (рис. 1). При постоянном φ все блоки тождественны из-за периодичности и имеют одинаковые системы уровней; при изменении φ все уровни изменяются одинаково во всех блоках с характерной амплитудой W_N . Возможность перехода из одного блока в другой приводит к расширению всех уровней в зоны с шириной порядка интеграла перекры-

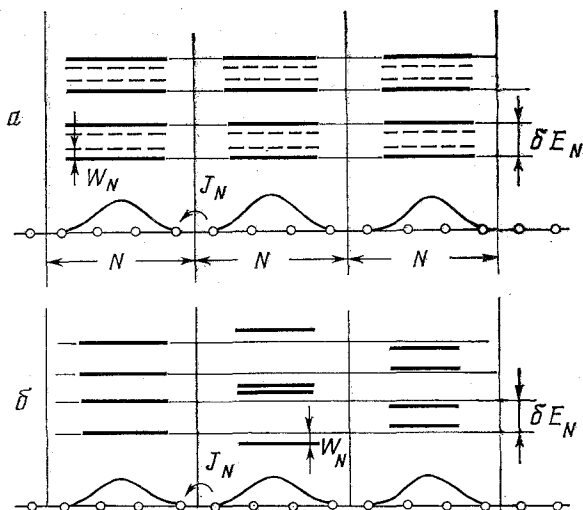


Рис. 1. Системы энергетических уровней и волновые функции, соответствующие движению внутри отдельных блоков; a — фаза φ постоянна в пространстве, штрихи — система уровней при другом значении φ ; b — φ линейно изменяется в пространстве

тия волновых функций J_N . Из формулы (4) видно, что независимо от конкретного вида функции f_s отношение характерной величины сдвига зоны при изменении φ к характерной ширине этой зоны определяется параметром $V(N)$. Таким образом,

$$V(N) \sim W_N/J_N. \quad (6)$$

Проведенные рассуждения, строго говоря, справедливы, когда ширина зон J_N мала по сравнению с расстоянием между ними δE_N (сильная связь). Поскольку $W_N \leq \delta E_N$ (см. рис. 1, b и ниже рис. 2), то оценка (6) верна во всяком случае при $V(N) \gg 1$.

Пусть теперь φ меняется в пространстве в соответствии с (5), т. е. линейно. Это приведет к тому, что уровни энергии в разных блоках станут различными, периодически осциллируя в пространстве. Если $\varphi(l)$ меняется достаточно медленно, чтобы аргумент косинуса в (4) не слишком быстро менялся в пределах блока:

$$\delta(2\pi M\varphi) \leq 1 \text{ при } \delta l \sim N, \quad (7)$$

то амплитуда осцилляций уровней будет $\sim W_N$, а интегралы перекрытия останутся $\sim J_N$. Если период осцилляции уровней T_N не слишком велик, например, не больше, чем Q блоков, т. е.

$$\delta(2\pi M\varphi) > 1/Q \text{ при } \delta l \sim N, \quad (8)$$

то параметр $V(N)$ можно интерпретировать как отношение величины сдвига уровней в соседних блоках к интегралу перекрытия J_N . Это отношение, как известно, действительно является хорошим скейлинговым параметром для локализации [8, 9].

Обсудим вопрос об ограничениях (7), (8). Из определения $\varphi(l)$ (5) получим

$$\delta(2\pi M\varphi) = 2\pi(\beta - M/N)N^2, \quad \delta l = N. \quad (9)$$

Из математики известно [10], что неравенство

$$|\beta - M/N| < 1/2N^2 \quad (10)$$

может быть достигнуто только тогда, когда M/N является подходящей дробью p_k/q_k числа β , т. е. получается обрывом цепной дроби (2) на k -й ступени (путем приравнивания β_k к нулю). Сравнивая (9) и (10), видим, что условие

$$\delta(2\pi M\varphi) < \pi, \quad \delta l = N$$

достигается только для подходящих дробей. Ввиду (7) мы, по существу, вынуждены брать в качестве M/N только подходящие дроби.

Пусть M/N является подходящей дробью p_k/q_k . Тогда, воспользовавшись известными рекуррентными соотношениями [10]

$$\begin{aligned} p_k &= n_k p_{k-1} + p_{k-2}, & p_0 &= 0, & p_1 &= 1, \\ q_k &= n_k q_{k-1} + q_{k-2}, & q_0 &= 1, & q_1 &= n_1, \end{aligned} \tag{11}$$

можно показать, что

$$\beta = \frac{p_k}{q_k + \gamma_k}, \quad \gamma_k = \frac{(-1)^{k+1} \beta_k}{p_k + \beta_k p_{k-1}} \sim \frac{\beta_k}{p_k}. \tag{12}$$

Подставляя (12) в (9), получаем оценку

$$\delta(2\pi M\varphi) \sim \pi \beta_k, \quad \delta l \sim N, \text{ если } M/N = p_k/q_k.$$

Считая β_k ограниченными снизу (к этому вопросу мы вернемся в § 2), мы легко удовлетворим условию (8).

Таким образом, интерпретация $V(N)$ как отношения величины сбоя уровней в соседних блоках к интегралу перекрытия, во всяком случае, справедлива, когда M/N — подходящая дробь. Этого достаточно для проведения масштабных преобразований. Покажем, что при $V(N) \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ имеет место локализация. Положим $N = q_k$ и выберем k так, чтобы $V(q_k) \gg Q$, см. (8). Объединим m блоков в один большой блок — ввиду $W_N \gg J_N$ коллективизации состояний не произойдет — волновые функции, соответствующие движению в отдельном блоке, останутся локализованными в нем. Это положение сохранится при увеличении m до некоторого m_{max} . Как мы покажем ниже, $m_{max} N > q_{k+1}$. Таким образом, радиус локализации «блочных» волновых функций не изменится при увеличении размера блока от q_k до q_{k+1} . Проводя новое разбиение на блоки размером $N = q_{k+1}$, можно повторить все рассуждение заново. Следовательно, конечный радиус локализации сохранится и при $N \rightarrow \infty$.

При определении m_{max} могут встретиться два случая.

а. Если период осцилляции уровней T_N таков, что T_N/N близко к целому числу m_0 с точностью $\sim 1/V(N)$, то $m_{max} = m_0$, так как первый и $(m_0 + 1)$ -й блоки имеют близкие уровни и при $m = m_0 + 1$ возможен резонанс. Из соотношения

$$T_N - q_{k+1} = \beta_{k+1} q_k,$$

которое следует из (5), (11), (12), и учитывая $V(N) \gg Q \approx \max_k (1/\beta_k)$, видим, что $q_{k+1} < m_0 q_k$, т. е. $q_{k+1} < m_{max} N$.

б. Если T_N/N не близко к целому числу и попадает в интервал $(m_0, m_0 + 1)$, то при $m = m_0 + 1$ резонанса не происходит и $m_{max} \geq m_0 + 1$. Поскольку $q_{k+1} < T_N$, то $q_{k+1} < (m_0 + 1) N \leq m_{max} N$.

Если же при $N \rightarrow \infty$ величина $V(N) \ll 1$, то, как легко показать, $W_N \ll J_N$, и при объединении нескольких блоков в один соответствующие им волновые функции смешиваются примерно с равными весами, т. е. происходит делокализация состояний. Таким образом, асимптотическое поведение $V(N)$ при $N \rightarrow \infty$ позволяет судить о характере собственных функций уравнения (1).

Приступим к выводу формулы (4). После наложения на волновые функции уравнения (3) бхоховского граничного условия

$$a_{l+N} = e^{ipN} a_l$$

спектр системы определяется детерминантом матрицы $N \times N$:

$$\Delta = \begin{vmatrix} V^{(1)} - E & 1 & 0 & 0 & \dots & e^{-ipN} \\ 1 & V^{(2)} - E & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & V^{(3)} - E & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ e^{ipN} & 0 & \dots & \dots & 1 & V^{(N)} - E \end{vmatrix}, \quad (13)$$

где

$$V^{(l)} = V \cos 2\pi(M/N)(l + \varphi). \quad (14)$$

Детерминант Δ является функцией p , φ , E , V . Зависимость его от p и φ удастся выяснить.

Заметим, что от p зависят лишь два элемента матрицы (13). Раскладывая детерминант по верхней строке, а получившиеся детерминанты — по столбцу, содержащему $\exp ipN$, получаем зависимость Δ от p :

$$\Delta(p) = 2(-1)^{N+1} \cos pN + \text{const}(p). \quad (15)$$

Для определения зависимости Δ от φ удобно ввести новую переменную ψ :

$$\psi = 2\pi(M/N)\varphi$$

и воспользоваться следующими свойствами:

$$\Delta(\psi) = \Delta(-\psi), \quad (16a)$$

$$\Delta(\psi + 2\pi M/N) = \Delta(\psi). \quad (16b)$$

Свойства (16) следуют из того, что замены $\varphi \rightarrow -\varphi$ и $\varphi \rightarrow \varphi + 1$ переводят систему, описываемую уравнением (3), в систему, физически ей эквивалентную: формально гамильтониан приводится к прежнему виду заменами соответственно $l \rightarrow -l$ и $l \rightarrow l - 1$. Детерминант же Δ , являясь полиномом от E , полностью определяется своими нулями, т. е. спектром уравнения (3).

Из вида (13) ясно, что Δ является суммой различных произведений $V^{(1)}, V^{(2)}, \dots, V^{(N)}$, а следовательно, в силу (14) — суммой членов вида

$$\cos^m \psi \sin^l \psi, \quad m + l \leq N.$$

Ввиду (16a) синусы входят лишь в четных степенях, поэтому их можно выразить через косинусы и записать

$$\Delta(\psi) = \sum_{k=0}^N A_k \cos^k \psi, \quad (17)$$

или, переразлагая в ряд Фурье,

$$\Delta(\psi) = \sum_{k=0}^N B_k \cos k\psi. \quad (18)$$

Из свойства (16b) и несократимости дроби M/N следует, что все коэффициенты B_k в (18), кроме B_0 и B_N , равны нулю. Для нахождения коэффициента B_N заметим, что член, содержащий $\cos^N \psi$, в (17) происходит лишь из произведения

$$V^{(1)} V^{(2)} \dots V^{(N)} = V^N \cos \psi \cos(\psi + 2\pi M/N) \dots \cos(\psi + 2\pi M(N-1)/N) = (-1)^{N+1} V^N \cos^N \psi + \dots,$$

что определяет A_N . Связь же B_N и A_N вытекает из разложения $\cos N\psi$ по степеням $\cos \psi$:

$$\cos N\psi = 2^{N-1} \cos^N \psi + \dots$$

В силу сказанного, зависимость Δ от ψ имеет вид

$$\Delta(\psi) = (-1)^{N+1} \frac{V^N}{2^{N-1}} \cos N\psi + \text{const}(\psi). \quad (19)$$

Объединяя (15) и (19), получаем секулярное уравнение в виде

$$\cos Np + (V/2)^N \cos 2\pi M\varphi = Q_N(E), \quad (20)$$

где $Q_N(E)$ — полином N -й степени относительно E .

Из эрмитовости матрицы (13) следует, что уравнение (20) имеет ровно N действительных корней при произвольных p и φ ; поэтому полином $Q_N(E)$ имеет вид, показанный на рис. 2, т. е. имеет $N-1$ экстремумов, разбивающих ось E на N интервалов монотонности $Q_N(E)$, на каждом из которых уравнение (20) можно разрешить относительно E и получить законы дисперсии каждой из N зон уравнения (3):

$$E = \varepsilon_s(p, \varphi) = f_s(\cos pN + (V/2)^N \cos 2\pi M\varphi), \quad s = 1, 2, \dots, N. \quad (21)$$

Тем самым получена формула (4) со скейлинговым параметром

$$V(N) = (V/2)^N. \quad (22)$$

Формула (22) определяет искомое преобразование ренорм-группы. В случае $V > 2$ имеем $V(N) \rightarrow \infty$ при $N \rightarrow \infty$, что означает локализацию всех состояний, а при $V < 2$ $V(N) \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$, что соответствует их делокализации. Тем самым $V=2$ является точкой перехода Андерсона в соответствии с результатами работы [1] для малых β_k .

Существенные изменения $V(N)$ происходят на характерной длине $\xi \sim |\ln(V/2)|^{-1}$, которая при $V > 2$ имеет смысл радиуса локализации и расходится вблизи порога по закону

$$\xi \propto |V-2|^{-1}, \quad (23)$$

т. е. с индексом 1 в согласии с результатами для малых β_k [1]. Поскольку несоизмеримая система общего вида сводится [1] к уравнению (1), этот индекс является универсальным. При $V < 2$ величина ξ имеет смысл эффективного периода системы — при размерах блока N в несколько ξ эффект осцилляции уровней можно считать отсутствующим, так что несоизмеримая система неотличима от периодической с периодом N .

2. Применим полученные результаты к случаю $\beta, \beta_1, \beta_2, \dots \ll 1$. При использовании в качестве M/N подходящей дроби p_k/q_k фаза $\varphi(l)$ оказывается медленно меняющейся:

$$\varphi(l) = -\frac{\gamma_k}{q_k + \gamma_k} l = \frac{(-1)^k \beta \beta_k}{p_k(p_k + \beta_k p_{k-1})} l \approx (-1)^k \frac{\beta \beta_k}{p_k^2} l \approx (-1)^k \frac{\beta_k}{p_k q_k} l \quad (24)$$

(использованы (5), (12)); поэтому применима квазиклассика, и для каждой из q_k зон, на которые в этом приближении разбивается спектр уравнения (1), может быть записано свое собственное уравнение Шредингера.

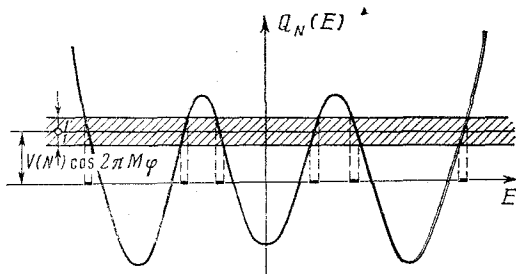


Рис. 2. Графическое решение уравнения (20). Сплошная кривая — полином $Q_N(E)$. Выделенные участки оси E соответствуют разрешенным зонам

Гамильтонианы этих зон получаются из (21) заменой $p \rightarrow \hat{p} = -id/dl$, $\varphi \rightarrow \varphi(l)$. Проводя масштабное преобразование

$$l/q_k \rightarrow l', \quad \hat{p}q_k \rightarrow \hat{p}', \quad (25)$$

получаем (опуская штрихи) уравнение Шредингера s -й зоны:

$$f_s(\cos \hat{p} + V_k \cos 2\pi\beta_k l) a(l) = E a(l), \quad (26)$$

$$V_k = (V/2)^{q_k}, \quad s=1, 2, \dots, q_k,$$

которое соответствует k -й ступени чертовой лестницы работы [1].

Для установления связи с работой [1] рассмотрим, как происходит переход с одной ступени чертовой лестницы на другую. На первой ступени $p_1/q_1 = 1/n_1$ (см. (2)), и уравнение (26) дает

$$f_s(\cos \hat{p} + V_1 \cos 2\pi\beta_1 l) a(l) = E a(l), \quad (27)$$

$$V_1 = (V/2)^{n_1}, \quad s=1, 2, \dots, n_1.$$

Для s , не близких к $n_1/2$, в [1] с помощью приближения сильной связи получено уравнение

$$(\cos \hat{p} + V_1 \cos 2\pi\beta_1 l) a(l) = E a(l), \quad (28)$$

т. е. функция $f_s(x)$ является линейной. Для s , близких к $n_1/2$, приближение сильной связи неприменимо и $f_s(x)$ существенно нелинейна. Однако при $\beta_1 \ll 1$ это не мешает переходу на следующую ступень чертовой лестницы. Следуя методу [1], полагаем $\beta_1 = 1/n_2$ и ищем законы дисперсии $\varepsilon_r(p, \varphi)$, $r=1, 2, \dots, n_2$ (индекс s считаем фиксированным и опускаем) зон уравнения (27). Они очевидным образом связаны с законами дисперсии $\varepsilon_r^0(p, \varphi)$ уравнения (28):

$$\varepsilon_r(p, \varphi) = f(\varepsilon_r^0(p, \varphi)).$$

При $\beta_1 \ll 1$ все зоны являются узкими и аргумент функции $f(x)$ меняется мало; раскладывая ее в ряд, получаем

$$\varepsilon_r(p, \varphi) = A_r + B_r \varepsilon_r^0(p, \varphi),$$

т. е. спектры $\varepsilon_r(p, \varphi)$ и $\varepsilon_r^0(p, \varphi)$ различаются лишь сдвигом энергии и постоянным множителем, что никак не сказывается на дальнейших итерациях. Учитывая, что уравнения (27) и (28) имеют одинаковые собственные функции и форму фазовых траекторий, можно сделать вывод, что при $\beta, \beta_1, \beta_2, \dots \ll 1$ можно пользоваться рассуждениями работы [1], не обращая внимания на неприменимость приближения сильной связи в некоторых участках спектра.

§ 2. Быстро убывающие β_k и слабая локализация

В § 1 мы считали β_k ограниченными снизу, чтобы период осцилляции уровней $T_N \sim N/\beta_k$ ($N=q_k$) был не слишком велик. При произвольных β_k сбой уровней между соседними блоками $\sim W_N/T_N \sim \beta_k W_N$ и роль скейлингового параметра играет величина $V_k \beta_k$ вместо V_k . В частности, условием локализации будет

$$V_k \beta_k \rightarrow \infty, \quad k \rightarrow \infty. \quad (29)$$

Ввиду быстрого роста V_k при $V > 2$:

$$V_k \sim (V/2)^{1/\beta \beta_1 \dots \beta_{k-1}} \quad (\text{для } \beta, \beta_1, \dots \ll 1),$$

отличие (29) от использованного выше условия $V_k \rightarrow \infty$ несущественно при любой разумной скорости убывания β_k при $k \rightarrow \infty$. Тем не менее, всегда можно построить последовательность β_k (а значит, найти иррациональное

число β) такую, что

$$V_k \beta_k \rightarrow 0, \quad V_k \rightarrow \infty \quad \text{при} \quad k \rightarrow \infty. \quad (30)$$

Рассмотрим этот случай подробнее.

Как подробно объяснялось в [1], несоизмеримая система имеет бесконечную последовательность характерных длин:

$$L_1 \sim 1/\beta, \quad L_2 \sim 1/\beta\beta_1, \dots, \quad L_k \sim 1/\beta\beta_1 \dots \beta_{k-1}, \dots \quad (31)$$

При длине системы $L \sim L_k$ в пределах системы помещается одна функция Ванье k -го порядка (см. [1]), радиус локализации которой $\xi(L_k)$ определяется размером классически достижимой области $\delta l \sim 1/V_{k-1}\beta_{k-1}$ для уравнения Шредингера ($k-1$)-й ступени (см. (26)). Вспомогательная, что единицей длины для этого уравнения является $L_{k-1} \sim q_{k-1}$ (см. (25)), получаем

$$\xi(L_k) \sim 1/V_{k-1}\beta\beta_1 \dots \beta_{k-1} \sim L_k/V_{k-1}.$$

Ввиду (30) имеем

$$\xi(L_k) \rightarrow \infty, \quad \xi(L_k)/L_k \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad k \rightarrow \infty,$$

т. е. при увеличении размеров системы радиус локализации расходуется, но убывает по сравнению с длиной системы.

Рассмотрим нормировочный интеграл волновых функций. При $L \sim L_1$ волновая функция имеет радиус локализации $\xi(L_1) \sim 1/V\beta$ и содержит с существенным весом $\sim 1/V\beta$ исходных функций Ванье; при $L \sim L_2$ она содержит $\sim 1/V_1\beta_1$ функций Ванье первого порядка, т. е. $\sim 1/V\beta V_1\beta_1$ исходных функций Ванье и т. д. Учитывая ортонормированность функций Ванье, получаем

$$\int_0^{L_k} |\psi(x)|^2 dx \sim \frac{1}{V\beta V_1\beta_1 \dots V_{k-1}\beta_{k-1}} \sim \frac{L_k}{VV_1 \dots V_{k-1}}.$$

Следовательно, в пределе $L \rightarrow \infty$

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx \rightarrow \infty, \quad \frac{1}{L} \int_0^L |\psi(x)|^2 dx \rightarrow 0,$$

т. е. нормировочный интеграл расходится, но медленнее, чем размер системы. Следовательно, волновые функции являются локализованными, но слабо — при удалении от центра локализации они в среднем убывают, но недостаточно быстро для обеспечения нормировки. Поскольку функции не являются квадратично интегрируемыми, то они принадлежат непрерывному спектру; спектр, однако, является сингулярно-непрерывным (см. терминологию в [11]), так как занимаемый им энергетический интервал имеет меру нуль (§ 3).

Любопытно, что при $L \sim L_{k+1}$ значения волновой функции на краях системы, как легко показать из уравнения (26),

$$\psi(L_{k+1}) \sim V_{k+1}^{-1/\beta_{k+1}} \sim (V/2)^{-1/\beta\beta_1 \dots \beta_k} \sim e^{-L_{k+1}/\xi}, \quad \xi \sim 1/\ln(V/2),$$

т. е. создается впечатление наличия постоянного радиуса локализации, такого же, как для медленно убывающих β_k . По этой причине подход Обри [6], основанный на использовании формулы Таулеса (в которую входят значения волновой функции лишь на краях системы), приводит к выводу об одинаковой локализации для всех иррациональных чисел β .

Из сказанного ясно, что для справедливости выводов § 1 и работы [1] необходимо ограничение на скорость убывания β_k (или роста n_k). Мы примем простейшее достаточное условие:

$$n_k < Ak^2 \quad \text{для всех} \quad k. \quad (32)$$

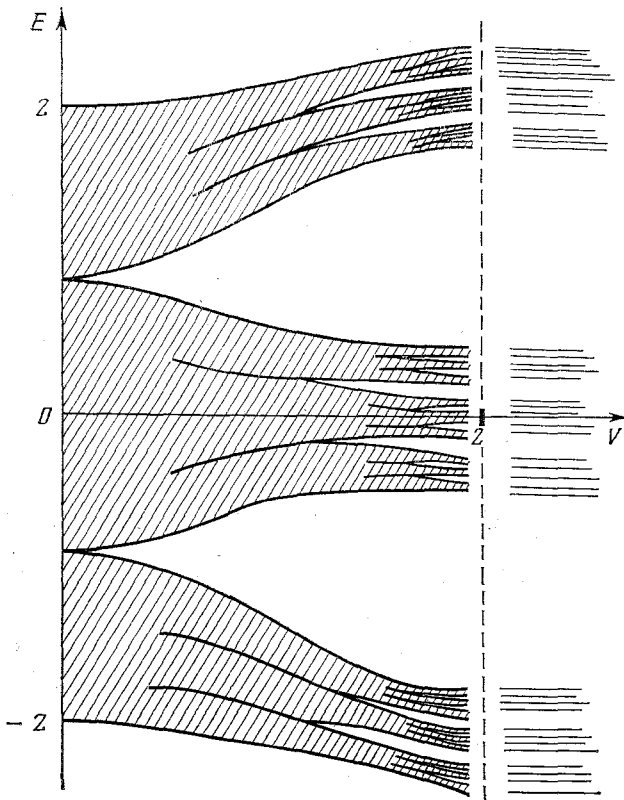


Рис. 3. Деформация спектра несоизмеримой системы при изменении V — заштрихованы разрешенные интервалы энергий. Все запрещенные зоны существуют при сколь угодно малых V , но имеют крайне малую ширину. При $V > 2$ спектр дискретен (или, в случае быстро убывающих β_n , сингулярно-непрерывен)

Множество чисел β , не удовлетворяющих этому условию ни при каких A , имеет меру нуль [10]; поэтому ослабление (32) представляет лишь академический интерес. При условии (32) к закону (23) могут возникнуть лишь логарифмические поправки, не влияющие на величину критического индекса.

Таким образом, выводы о характере волновых функций несоизмеримой системы, полученные в § 1 и [1], справедливы почти для всех иррациональных чисел. Подытоживая их, можно сформулировать следующую теорему, которая заменяет для несоизмеримых систем теорему Блоха.

Для каждого малого участка спектра несоизмеримой системы существует критическое значение потенциала V_c , при котором происходит фазовый переход. Этот переход характеризуется некоторой длиной $\xi(V)$, расходящейся вблизи перехода с индексом 1, а вдали от перехода имеющей порядок величины межатомного расстояния. При $V > V_c$ волновые функции экспоненциально локализованы в области размером $\sim \xi$, а при $V < V_c$ — неотличимы от блоховских волн, соответствующих периоду $\sim \xi$.

§ 3. Энергетический спектр

В последующих вычислениях (§§ 3, 4) мы ограничимся рассмотрением таких иррациональных чисел, для которых $\beta, \beta_1, \beta_2, \dots \ll 1$, так как это сильно упрощает вычисления и делает физическую картину более прозрачной. Эти числа, хотя и составляют множество меры нуль, но, как мы видели в § 1, являются типичными представителями иррациональных чисел.

Энергетический спектр несоизмеримой системы имеет структуру чертовой лестницы [1, 3]: исходная зона шириной ~ 1 в первом приближении (на первой ступени чертовой лестницы) расщепляется на $n_1 \sim 1/\beta_1$ зон первого порядка, каждая из которых расщепляется на n_2 зон второго порядка и т. д. Деформация спектра при изменении V показана на рис. 3: при увеличении V происходит рост ширины запрещенных зон, а энергетический интервал, занимаемый спектром Γ (т. е. суммарная ширина разрешенных зон), уменьшается. При $V > 2$ величина Γ обращается в нуль. Действительно, ввиду того, что уравнение (20) имеет ровно N действительных корней при любых p и q , полином $Q_N(E)$ должен иметь амплитуду осцилляций не меньше, чем $V(N)+1$ (см. рис. 2); поэтому при $V(N) \gg 1$ полная ширина разрешенных зон

$$\Gamma_{(N)} \leq 1/V(N) \sim (V/2)^{-N}$$

и стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$. Это согласуется с тем, что локализованные состояния соответствуют дискретному спектру.

Выясним, по какому закону Γ обращается в нуль при приближении к порогу со стороны металлической области. Пусть $V = 2 - \delta$, $\delta \ll 1$. На первой ступени чертовой лестницы исходная зона шириной $\Gamma_{(0)} \sim 1$ расщепляется на n_1 зон; ширина почти всех этих зон экспоненциально мала, порядка V^{-n_1} . Исключение составляют зоны, находящиеся в энергетическом интервале ширины $\sim \beta$ вблизи $E = 0$, т. е. вблизи центра исходной зоны. В этом интервале нарушается приближение сильной связи и ширина зон оказывается порядка расстояния между ними. Поэтому полная ширина зон на первой ступени

$$\Gamma_{(1)} \sim \beta.$$

На второй ступени каждая из зон первого порядка расщепляется на n_2 зон второго порядка, из которых все экспоненциально малы, кроме центральных, так что

$$\Gamma_{(2)} \sim \Gamma_{(1)} \beta_1 \sim \beta \beta_1,$$

и вообще на k -й ступени

$$\Gamma_{(k)} \sim \beta \beta_1 \dots \beta_{k-1}. \quad (33)$$

Однако этот процесс не продолжается до бесконечности, так как коэффициенты V_k в гамильтониане (26) для k -й ступени убывают и ширина запрещенных зон уменьшается. Поэтому для получения величины Γ надо в качестве k в (33) поставить число шагов, за которое последовательность V_k от исходного $V_0 = V = 2 - \delta$ уменьшится до некоторого малого значения. Раскладывая (22) вблизи порога и учитывая, что в рассматриваемом случае $N \sim 1/\beta \beta_1 \dots \beta_{k-1}$, получаем

$$V_k - 2 = (V - 2) / \beta \beta_1 \dots \beta_{k-1}.$$

Полагая $V_k - 2 = \text{const}$ и сравнивая с (33), получаем

$$\Gamma \sim |V - 2|, \quad (34)$$

т. е. Γ стремится к нулю по степенному закону с критическим индексом, равным $1^{(1)}$.

Закон (34) сохраняется, если под Γ понимать полную ширину разрешенных зон, находящихся внутри некоторого интервала ΔE , расположенного в произвольном участке спектра, так как этот интервал содержит несколько зон k -го порядка, устроенных так же, как исходная зона. Коэффициент же в зависимости (34) сильно зависит от положения интервала ΔE в спектре, меняясь от единицы до экспоненциально малых величин.

¹⁾ Строго говоря, индекс найден с логарифмической точностью до членов $\sim (\ln 1/\max \beta_k)^{-1}$. Однако единственная возможность для него быть универсальным, т. е. не зависеть от параметров модели, — быть равным единице точно.

§ 4. Проводимость

Пусть в рассматриваемом несоизмеримом потенциале находится система невзаимодействующих электронов, которые заполняют найденные выше одноэлектронные состояния в соответствии с принципом Паули. Найдем проводимость такой системы.

Как объяснялось в [1], несоизмеримая система обладает последовательностью характерных длин

$$L_1 \sim 1/\beta, \quad L_2 \sim 1/\beta\beta_1, \dots, \quad L_k \sim 1/\beta\beta_1 \dots \beta_{k-1}, \dots,$$

которые являются квазипериодами системы: в первом приближении несоизмеримая система похожа на периодическую с периодом L_1 , с еще большей точностью она приближается периодической системой с периодом L_2 и т. д. Непосредственно из этих соображений вытекает простой способ вычисления проводимости.

Нас интересует проводимость макроскопического образца. Переход к макроскопическому пределу $L \rightarrow \infty$ удобно произвести специальным образом. Выберем m такое, что $1 \ll m \ll \min_k (1/\beta_k)$. Пусть длина системы L попадет в интервал

$$mL_{k+1} \geq L \geq mL_k. \quad (35)$$

Ввиду условия $L \geq mL_k \gg L_k$, на длине системы укладывается много периодов L_k . Будем считать, что спектр системы определяется этим периодом, а влияние периодичности следующего порядка, с периодом L_{k+1} , учтем как возмущение. Пусть J_k — ширина одной из зон, соответствующей периоду L_k . Для образца длины L эта зона состоит из L/L_k отдельных уровней; расстояние между ними $\sim J_k L_k/L$. Влияние периода L_{k+1} проявляется в виде периодической осцилляции этих уровней с амплитудой W_k . Выберем k так, чтобы

$$W_k \ll J_k L_k/L \quad (36)$$

— в металлической фазе это всегда возможно, так как при $V < 2$ последовательность $V_k = W_k/J_k$ экспоненциально убывает (§ 1), $V_k \sim \exp(-L_k/\xi)$, а $L_k/L \geq L_k/mL_{k+1} \sim 1/m\beta_k$ ввиду (35) (мы не рассматриваем быстро убывающие β_k , см. § 2). При условии (36) периодичность $(k+1)$ -го порядка вызывает лишь малое изменение волновых функций системы. Однако длина пробега l — это расстояние, на котором рассеивающий потенциал вызывает существенное изменение волновых функций свободного движения (по Мотту [12] — это сбой фазы): на этом расстоянии должно произойти одно столкновение, т. е. набраться коэффициент отражения ~ 1 . Поэтому при условии (36) будет $l > L$, т. е. рассеяние происходит в основном на границах образца.

Поскольку W_k/J_k с ростом k быстро убывает, то все изложенные выше рассуждения справедливы для всех k , больших, чем указанное выше. Поэтому все, что нужно сделать, — вычислить проводимость периодической системы с периодом L_k конечной длины L из интервала (35) и перейти к макроскопическому пределу, устремив k к бесконечности.

Проводимость периодической системы оценивается обычным образом, но с учетом того обстоятельства, что спектр имеет сколь угодно мелкую структуру, так что даже в пределах теплового размытия распределения Ферми находятся как разрешенные, так и запрещенные зоны. Как обычно, можно считать, что электрическое поле F вызывает сдвиг фермиевского распределения на величину

$$\delta p \sim eF\tau/\hbar,$$

где τ — время релаксации. Поэтому неравновесная функция распределения

$$f_p = f^0(\epsilon_{p+\delta p}) \approx f^0(\epsilon_p) + \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} v_p \delta p,$$

где $f^0(\epsilon)$ — фермиевская функция. Электрический ток равен

$$j \sim e \int v_p f_p dp \sim \frac{e^2}{\hbar} FL \int \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} v_p dp,$$

где мы заменили tv_p на длину свободного пробега, которая определяется длиной системы L . Отсюда проводимость

$$\sigma(L) \sim \frac{e^2}{\hbar} L \int \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon} d\epsilon, \quad (37)$$

где интегрирование проводится только по разрешенным интервалам энергии. Если в пределах теплового размытия нет запрещенных зон, то интеграл в (37) равен единице; в общем же случае он определяется плотностью разрешенных зон вблизи уровня Ферми:

$$\sigma(L) \sim (e^2/\hbar) L (\Delta\Gamma/\Delta E)_k, \quad mL_{k+1} \geq L \geq mL_k, \quad (38)$$

где $\Delta\Gamma$ — суммарная ширина разрешенных зон в интервале $\Delta E \sim T$, находящемся вблизи уровня Ферми, индекс k указывает, что спектр соответствует k -й ступени чертовой лестницы. Формула (38) дает нужную нам оценку. Эта оценка является точной при $L \gg \xi$ в металлической фазе, но может использоваться как оценка сверху при $L \leq \xi$ и в области локализованных состояний (при этом условие $l > L$ не выполняется и мы выбрасываем существенный источник рассеяния).

Как ясно из предыдущего параграфа,

$$\left(\frac{\Delta\Gamma}{\Delta E} \right)_k \sim \begin{cases} \text{const}, & V < 2 \\ e^{-L_k/\xi}, & V > 2 \end{cases}, \quad k \rightarrow \infty,$$

поэтому при $L \rightarrow \infty$ имеем

$$\begin{aligned} \sigma(L) &\sim L, & V < 2, \\ \sigma(L) &\leq L e^{-L/\xi}, & V > 2, \end{aligned} \quad (39)$$

а следовательно, для бесконечной системы

$$\sigma = \begin{cases} \infty, & V < 2, \\ 0, & V > 2. \end{cases} \quad (40)$$

Таким образом, в металлической фазе беспорядка, связанного с несоизмеримостью, оказывается недостаточно для формирования в системе собственной длины свободного пробега — это согласуется с высказанной в § 1 точкой зрения, что при $V < 2$ несоизмеримая система ведет себя как периодическая с периодом $\sim \xi$; в области же локализованных состояний проводимость, как и положено, обращается в нуль.

Интересно, что предсказанные Азбелем [3] осцилляции σ в зависимости от L имеют существенную амплитуду только при $L \leq \xi$. Легко видеть, как они возникают. При $L \leq \xi$ неравенство $l > L$ выполняется только в интервалах

$$L_k/\beta_k^{\frac{1}{2}} \gg L \gg L_k \quad (41)$$

(максимальный разброс уровней, связанный с L_{k+1} , имеет в пределах системы величину $\sim W_k L/L_{k+1}$, он должен быть меньше, чем $J_k L_k/L$; учитывая, что $W_k \sim J_k$ при $L \leq \xi$, получим (41)). В интервале (41) справедлива оценка (38); при дальнейшем увеличении L условие $l > L$ нарушается и σ перестает зависеть от L до тех пор, пока при $L \sim L_{k+1}$ не начинается перестройка спектра под период L_{k+1} ($(\Delta\Gamma/\Delta E)_k$ изменяется до $(\Delta\Gamma/\Delta E)_{k+1}$). При $L \gg \xi$ неравенство $l > L$ устанавливается во всем интервале длин, а по-

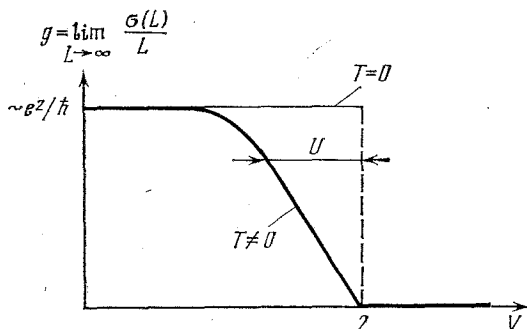


Рис. 4. Поведение проводимости несоизмеримой системы вблизи порога локализации

следовательность $(\Delta\Gamma/\Delta E)_k$ выходит на свое предельное значение, поэтому осцилляции затухают и зависимость $\sigma(L)$ асимптотически выходит на линейную²⁾.

Для более подробного изучения поведения проводимости вблизи порога рассмотрим величину

$$g = \sigma(L)/L, \quad L \rightarrow \infty,$$

которая является полной (не удельной) проводимостью макроскопического образца, т. е. непосредственно наблюдаемой величиной. В металлической области g является константой:

$$g \sim (e^2/\hbar) (\Delta\Gamma/\Delta E).$$

Дальнейшие результаты зависят от того, какой из пределов $T \rightarrow 0$ или $V \rightarrow 2$ берется первым; рассмотрим по порядку два случая.

а. $T \neq 0, V \rightarrow 2$. В этом случае интервал $\Delta E \sim T$ постоянен. Поскольку полная ширина разрешенных зон в любом интервале ΔE убывает по закону (34), то

$$g \propto (2 - V).$$

б. $V \neq 2, T \rightarrow 0$. В этом случае мы должны устремить ΔE к нулю. Поскольку при уменьшении ΔE мы переходим ко все более высоким ступеням чертовой лестницы (сначала внутри ΔE помещается одна зона k -го порядка, потом одна зона $(k+1)$ -го порядка и т. д.), а коэффициенты V_k в гамильтониане k -й ступени (26) убывают с ростом k , то содержание запрещенных зон внутри ΔE уменьшается, так что

$$\Delta\Gamma/\Delta E \rightarrow 1, \quad \Delta E \rightarrow 0;$$

поэтому

$$g \propto \text{const.}$$

Полная картина зависимости g от V представлена на рис. 4. Величина U , определяющая, на каком расстоянии от порога происходит переход с постоянной зависимости на линейную, имеет порядок

$$U \sim \alpha T,$$

где коэффициент α сильно зависит от положения уровня Ферми и, вообще говоря, экспоненциально велик (он связан с коэффициентом в зависимости (34)). Заметим, что наличие резкого перехода при $T \neq 0$ связано с отсутствием неупругих процессов рассеяния.

Несколько слов о зависимости g от положения уровня Ферми ϵ_F . При $T=0$ эта зависимость является плавной за исключением изолированных точек, в которых g обращается в нуль и которые соответствуют пересече-

²⁾ Для быстро убывающих β_k (§ 2) осцилляции сохраняются и при $L \gg \xi$.

нию уровнем Ферми границ зон. При конечных, но малых T изолированные точки размываются в минимумы конечной ширины и зависимость $\sigma(\epsilon_F)$ становится осциллирующей; однако огибающая максимумов остается плавной. Наконец, при T больше некоторой T_0 зависимость $\sigma(\epsilon_F)$ становится крайне нерегулярной — амплитуда осцилляций экспоненциально сильно меняется при изменении ϵ_F . Температура T_0 имеет порядок ширины J_A наиболее узкой из зон k -го порядка, соответствующих ступени с $L_n \sim \xi$.

Автор признателен **И. М. Лифшицу**, А. Ф. Андрееву и А. Л. Эфросу за обсуждение результатов работы и А. Л. Талапову за обсуждение ряда вопросов теории несоизмеримых систем.

Литература

1. *Суслов И. М.* ЖЭТФ, 1982, **83**, 1079.
2. *Покровский В. Л., Талапов А. Л.* ЖЭТФ, 1980, **78**, 269.
3. *Azbel M. Ya.* Phys. Rev. Lett., 1979, **43**, 1954.
4. *Anderson P. W.* Phys. Rev., 1958, **109**, 1492. *Thouless D. J.* Phys. Rept., 1974, **13C**, 94.
5. *Sokoloff J. B.* Phys. Rev. B, 1981, **23**, 2039; 1981, **23**, 6422; 1980, **22**, 5823.
6. *Aubry S.* Annals of the Israel Physical Society/Ed. by C. G. Kuper. Bristol: Adam Hilger, 1979, v. 3, p. 133.
7. *Soukoulis C. M., Economou E. N.* Phys. Rev. Lett., 1982, **48**, 1043.
8. *Abrahams E., Anderson P. W., Licciardello D. C., Ramakrishnan T. V.* Phys. Rev. Lett., 1979, **42**, 673.
9. *Edwards J. T., Thouless D. J.* J. Phys. C, 1972, **5**, 807. *Licciardello D. C., Thouless D. J.* J. Phys. C, 1975, **8**, 4157.
10. *Хинчин А. Я.* Цепные дроби. М., 1961, §§ 2, 7, 13.
11. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики, т. I. М.: Мир, 1977, с. 256. *Johnston R. J.* Phys. C, 1981, **14**, 1145.
12. *Морт Н., Дэвис Э.* Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир, 1974.

Институт физических проблем
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
6.IX.1982;
после переработки
23.XII.1982

ELECTRON CONDUCTIVITY IN INCOMMENSURABLE SYSTEMS NEAR THE LOCALIZATION THRESHOLD

I. M. Suslov

A system of noninteracting electrons moving in the field of two periodic potentials with incommensurable periods is considered. An Anderson transition occurs in such systems at a certain value of the potential V_c . The conductivity of a finite specimen (size L) is $\sigma(L) \propto \exp(-L/\xi)$ in the localized state region ($V > V_c$) and $\sigma(L) \propto L$ in the metallic phase ($V < V_c$). The quantity $g = \sigma(L)/L$ for $L \rightarrow \infty$, i. e. the total (not specific) conductivity of a macroscopic specimen vanishes at the transition point discontinuously for $T=0$ and linearly at a finite temperature.