



**Beynəlxalq Konfrans "Fizika-2005"**  
**International Conference "Fizika-2005"**  
**Международная Конференция "Fizika-2005"**

7 - 9  
iyun  
June 2005  
Июнь

səhifə  
№110 page 418-422  
стр.

**Bakı, Azərbaycan**

**Baku, Azerbaijan**

**Баку, Азербайджан**

**ПРИМЕНЕНИЕ ОБЩЕЙ ТЕОРИИ КВАНТОВЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ  
К ПЕРЕХОДАМ МЕТАЛЛ—ИЗОЛЯТОР**

**В.Ф.ГАНТМАХЕР**

*Институт физики твердого тела РАН,  
142432 Черногловка, Московская обл., Россия*

Показано, что переход металл-изолятор описывается общей теорией квантовых фазовых переходов со значениями критических индексов  $\nu = 1$  и  $z = 3$ .

В последние годы широкое распространение получила теория непрерывных квантовых фазовых переходов (см., например, [1,2]). Разработанная первоначально применительно к модели Изинга, она затем стала применяться и к другим переходам при температуре  $T = 0$ , в частности, к переходам, в которых при некотором критическом значении  $x_c$  управляющего параметра  $x$  (уровня беспорядка, электронной концентрации, магнитного поля и т.п.) происходит локализация электронов в случайном потенциале. Применимость теории к таким "локализационным" переходам должна являться предметом экспериментальной проверки. Однако возможности такой проверки сравнительно невелики и обычно сводятся к практически всегда успешным скейлинговым построениям кривых проводимости. Поэтому в дискуссии требуются дополнительные аргументы. В данной работе обсуждается вопрос о применимости теории квантовых фазовых переходов (QPT) к переходу металл-изолятор в трехмерном пространстве.

Теория квантовых фазовых переходов [1,2] построена подобно теории термодинамических непрерывных фазовых переходов, но оперирует квантовыми флуктуациями вместо тепловых. Тепловые флуктуации имеют среднюю энергию порядка  $T$ ; эта энергия берется из теплового резервуара.

Квантовые флуктуации возникают благодаря соотношению неопределенности. Наличие квантовых флуктуации означает, что в материале, находящемся при  $T = 0$  в состоянии вблизи фазового перехода, в течение времени  $\tau_f$  могут существовать области

энергетически невыгодной фазы с характерными размерами  $\xi$ . Виртуальная энергия, необходимая для появления такой области, зависит от расстояния до перехода  $\delta x = x - x_c$ . Она в свою очередь ограничивает время  $\tau_f$ : время  $\tau_f$  тем меньше, чем больше энергия квантовой флуктуации.

Поскольку измерения всех физических величин происходят при конечных температурах  $T \neq 0$ , температура должна быть включена в теорию, несмотря на то, что температура  $T$  исходно вообще не фигурирует в задаче. Теория делает это путем отображения модели квантового фазового перехода в  $d$ -мерном пространстве на модель классического фазового непрерывного перехода при конечной температуре в  $D = d + 1$ -мерном пространстве. Осуществить такое отображение позволяет сходство математического аппарата, используемого в квантовой механике и в статистической физике.

Центральное место в описании систем, находящихся в тепловом равновесии, занимает статистическая сумма

$$Z = \sum_i \exp^{-\varepsilon_i / T} \quad (1)$$

в которой суммирование происходит по всем возможным состояниям системы, а  $\varepsilon_i$  — энергии этих состояний. С помощью функции  $Z$  можно вычислять значения физических величин, характеризующих систему в равновесии. В частности через статистическую сумму  $Z$  выражается вероятность  $p_i$  пребывания системы в состоянии с энергией  $\varepsilon_i$  зависящая от температуры  $T$  как  $p_i \propto \exp(-\varepsilon_i / T)$ :

$$p_i = \frac{e^{\varepsilon_i/T}}{\sum_i e^{\varepsilon_i/T}} = \frac{e^{\varepsilon_i/T}}{Z} \quad (2)$$

В точках фазовых переходов функция  $Z$  имеет особенности и теряет аналитичность.

Обозначим через  $q$  точку в координационном пространстве нашей системы. Пусть  $\varphi_i(q)$  — волновая функция в состоянии  $i$ , так что вероятность того, что система находится в точке  $q$ , будучи в этом состоянии, равна  $\varphi_i^*(q)\varphi_i(q)$ . Если  $\varphi_i(q)$  лишь одно из многих возможных состояний системы, то полная вероятность  $P(q)$  найти ее в точке  $q$  получается усреднением по всем состояниям:

$$P(q) = \frac{1}{Z} \sum_i \int \varphi_i^*(q)\varphi_i(q) e^{\varepsilon_i/T} \quad (3)$$

Поскольку интеграл  $\int P(q) dq = 1$ , статистическая сумма  $Z$  равна сумме интегралов

$$Z = \sum_i \int \varphi_i^*(q)\varphi_i(q) e^{\varepsilon_i/T} dq \quad (4)$$

причем суммирование происходит по полной системе функций  $\{\varphi_i\}$ .

Интегралы, входящие под знаком суммы в выражение (4) для статистической суммы  $Z$ , очень похожи на матричные элементы оператора  $\hat{S}$  эволюции квантовой системы во времени

$$\hat{S} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right) \quad (5)$$

где  $\hat{H}$  — гамильтониан с собственными значениями  $\varepsilon_i$ . Этот оператор переводит зависящую от времени волновую функцию системы  $\Phi$  в начальный момент времени в волновую функцию в произвольный момент времени:

$$\hat{S}\Phi(q,0) = \Phi(q,t) = \sum_i e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} \varphi_i(q) \quad (6)$$

и его естественно использовать при описании квантовых флуктуации. Диагональные матричные элементы оператора  $\hat{S}$

$$\int \varphi_i^*(q)\varphi_i(q) e^{-i\varepsilon_i t/\hbar} dq \quad (7)$$

переходят в интегралы из (4), если ввести мнимое время  $\hat{\tau}$ :

$$\frac{1}{T} = -i \frac{\hat{\tau}}{\hbar} \quad \hat{\tau} = i \frac{\hbar}{T} \quad (8)$$

Подстановка (8) позволяет трактовать входящие в сумму (4) интегралы как амплитуды эволюции системы в мнимом времени. Эволюция начинается с состояния  $|j\rangle$  и через время  $i\hbar/T$  возвращается в  $|j\rangle$  через ряд промежуточных состояний. Наоборот, описание эволюции системы под влиянием квантовых флуктуации можно представить как статистическую сумму  $Z_D$  некоторой воображаемой

термодинамической системы. Для этого нужно добавить к  $d$ -мерному пространству, в котором реально находится квантовая система, дополнительное направление  $t$ , отложить в этом направлении отрезок длины  $\hat{\tau} = i\hbar/T$

$$0 < \hat{\tau} < \tilde{\tau} \quad (9)$$

и написать статистическую сумму для классического фазового перехода системы в получившейся гиперполосе. Конечная температура квантовой системы, находящейся в окрестности квантового фазового перехода, превращается в ограничение размера классической системы вдоль дополнительной оси. При понижении температуры размер  $i\hbar/T$  растет и система становится "пространственно" неограниченной.

$D = (d + 1)$ -мерное пространство, в котором должен происходить воображаемый термодинамический фазовый переход, является анизотропным. Одна из осей в нем принципиально отличается от остальных. Это может отразиться на корреляционных длинах. Сохранив традиционное обозначение  $\xi$  для корреляционной длины в обычном  $d$ -мерном подпространстве, корреляционную длину вдоль новой оси обозначим  $\xi_\phi$ .

Величина  $\xi_\phi$  имеет ту же размерность, что и

$i\hbar/T$ , т.е. измеряется в секундах:  $\xi_\phi \propto i\tau_f$ .

Однако поскольку ось мнимого времени является одной из осей  $D$ - мерного пространства, то "длина"  $\xi_\phi$  в соответствующем направлении выступает в той же роли, что и настоящая длина  $\xi$ .

Будем приближаться к переходу, поддерживая нулевую температуру  $T = 0$  и устремляя к критическому значению управляющий параметр

$|\delta x| \rightarrow 0$ . Тогда расходятся будут обе корреляционные длины, но критические индексы могут быть вообще говоря разные. Обычно это записывается в таком виде:

$$\xi \propto |\delta x|^{-\nu}, \quad \xi_\phi \propto \xi^z \quad (10)$$

Показатели степени  $\nu$  и  $z$  называются критическими индексами, причем к названию индекса  $z$  добавляют слово "динамический". И названия, и обозначения происходят из теории термодинамических переходов. В частности динамический критический индекс входит там в соотношение, связывающее время жизни тепловых флуктуации с их размером:  $\tau_f \propto \xi^z$ . В квантовой задаче при  $T = 0$  все выглядит очень похоже: длина  $\xi$  характеризует пространственные корреляции квантовых флуктуации, а время  $\xi_\phi$  их временные корреляции.

Пусть теперь температура  $T \neq 0$ . Конечная температура привносит в квантовую задачу характерную энергию  $T$ . Флуктуации с энергиями  $\hbar\omega < T$  становятся классическими; они черпают энергию из термостата, числа заполнения соответствующих мод растут. Флуктуации с энергиями  $\hbar\omega > T$  остаются квантовыми.

Ограничение энергии квантовых флуктуации снизу означает, что их пространственный размер  $\xi$  ограничен сверху

$$\hbar\omega = \hbar/\xi_\phi > T, \quad \xi \propto \xi_\phi^{1/2} \leq (\hbar/T)^{1/2} \propto L_\phi \quad (11)$$

Степень  $1/2$  во втором из соотношений (11) появилась из-за того, что у величины  $L_\phi$  должна быть настоящая размерность длины, как у  $\xi$  (ср. с соотношением (10)).

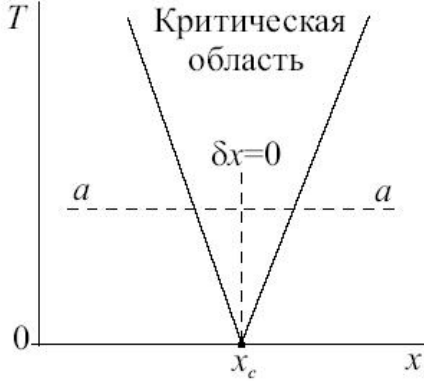


Рис. 1. Схематическое изображение критической области в теории квантовых фазовых переходов.

Таким образом в окрестности квантового фазового перехода имеются две характерные длины:  $\xi$  и  $L_\phi$ . Обе расходятся на переходе, но расходимость одной контролируется величиной отклонения  $\delta x = x - x_c$  управляющего параметра от критического значения, а расходимость другой контролируется температурой.

Уравнение

$$\xi = L_v \quad (12)$$

определяет две линии, выходящие из точки  $(x_c, 0)$ , одну в области  $x > x_c$ , другую в области  $x < x_c$ .

Область  $L_\phi \leq \xi$  между ними называется критической (см. рис.1). На схеме на рис.1 фазовый переход изображается изолированной точкой на оси абсцисс. В принципе в точке  $(x_c, 0)$  может заканчиваться линия термодинамических переходов  $T_c(x)$ , но мы ограничимся здесь случаем изолированной точки.

Своеобразную форму критической области на рис.1 можно прокомментировать следующим образом. Энергия системы при низких температурах представляет собой сумму энергий основного состояния и совокупности квазичастиц. И то, и другое меняется на переходе. Поэтому при движении по плоскости  $(x, T)$  при постоянной температуре (кривая  $aa$  на рис.1) непосредственно над точкой  $x_c$  должен быть участок, где для описания системы нельзя использовать ни те, ни другие квазичастицы. Естественно, что ширина этого участка тем больше, чем выше температура.

Предположим, что меняя управляющий параметр  $x$ , мы двигаемся по фазовой плоскости  $(x, T)$  вдоль линии  $aa$ . При этом непосредственно в точку фазового перехода мы не попадаем. Поэтому при этом движении не должна обращаться в бесконечность ни одна из характерных величин, ни  $\xi$ , ни  $\xi_\phi$ . Поскольку

система "пространственно" ограничена гиперполосой (9), то возможные значения  $\xi_\phi$  тоже ограничены:  $\xi_\phi < \hbar/T$ . Пока мы находимся на линии  $aa$  далеко от ее средней части, то величина  $\delta x$  определяет  $\xi$ , а через соотношения (10) и  $\xi_\phi$ . В какой-то момент  $\xi_\phi$  достигает предельного значения и ее рост прекращается; теперь из соотношения (10) следуют ограничения для размера квантовых флуктуации  $\xi_\phi$ .

Исторически переходы металл-изолятор (МИТ) были первыми в ряду квантовых локализационных переходов. В 1979 году появилась работа [3], которая описала квантовый МИТ при нулевой температуре. В качестве главного фактора, обеспечивающего переход, она использовала беспорядок, предполагая, что взаимодействие между электронами вообще отсутствует. Работа [3] сыграла важную роль для понимания особенностей МИТ, но это была роль "теоремы существования". В работе [3] было показано, что в системе невзаимодействующих электронов переход в пространстве с размерностью  $d = 2$  отсутствует, а при  $d = 3$  существует и является непрерывным: вблизи перехода проводимость равна

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \xi^{-1} \quad (13)$$

и поэтому может быть сколь угодно малой, так как  $\xi$  на переходе расходится [4]. Однако, исследование критической окрестности перехода осталось за пределами теории [3, 4]. Поэтому представляет интерес описать эту окрестность в терминах теории QPT [1, 2]. В окрестности МИТ тоже имеется, помимо  $\xi$ , вторая характерная длина, зависящая от температуры и расходящаяся при  $T = 0$ . В металлической области она называется длиной потери фазы, т.е. длиной, на которой сохраняется когерентность диффундирующих электронов.

Механизмов расфазировки несколько. Обычно в качестве  $L_v$  с металлической стороны перехода выбирают длину

$$L_{ee} = \sqrt{\hbar D/T} \quad (14)$$

на которой происходит расфазировка двух диффундирующих электронов с разностью энергий порядка  $T$  ( $D$  — коэффициент диффузии, который в непосредственной окрестности перехода сам становится зависящим от температуры [5-7]). Со стороны изолятора роль  $L_v$  выполняет средняя длина  $\bar{r}$  прыжка электрона из одного локализованного состояния в другое:

$$\bar{r} \approx \left( \frac{\xi}{g_\mu T} \right)^{1/4} \quad (15)$$

И то, и другое естественно считать максимальным размером квантовых флуктуации, как это предполагается уравнением (11).

Внутри критической области значения всех физических величин зависят только от корреляционных длин. Поскольку в окрестности QPT корреляционных длин (10) две, скейлинговые формулы оказываются более сложными, чем для классических фазовых переходов. В частности,

скейлинговая формула для электрической проводимости  $\sigma$  имеет вид [8]:

$$\sigma \propto \xi^{2-d} f\left(\frac{L_\varphi}{\xi}\right) \propto \xi^{2-d} f_1\left(\frac{\delta x}{T^{1/z\nu}}\right) \quad (16)$$

Обычно при описании проводимости в критической области переходов металл-изолятор в трехмерной среде,  $d = 3$ , пользуются интерполяционной формулой

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{\xi} + \frac{1}{L_\varphi} \right) \quad (17)$$

которая позволяет связать между собой выражение для проводимости вблизи перехода на его металлической стороне при  $T = 0$ :

$$\sigma(T = 0, \delta x > 0) = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{\xi} \quad (18)$$

и выражение для проводимости при конечной температуре в глубине металлической области

$$\sigma(T, \xi \sim l) \equiv \sigma_0 + \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{L_\varphi} = \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{l} + \frac{1}{L_\varphi} \right) \quad (19)$$

Формула (17) приобретает общий вид (16), если положить  $f(u) = 1 + 1/u$ , а  $fi(u) = 1 + 1/u^3$ . Это позволяет описать переход металл-изолятор в терминах теории QPT [1, 2].

Формула (17) неоднократно проверялась экспериментально. Например, на рис.2 приведены экспериментальные кривые [9, 10] температурной зависимости проводимости Ge:As при разной концентрации носителей  $n$ , выполняющей здесь роль управляющего параметра  $x$ . В критической области находятся образцы с концентрацией носителей  $n < 4.2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ . То, что экспериментальные точки для этих образцов ложатся при выбранных осях на прямые, означает что  $z\nu = 3$ . Из того, как прямые смещаются при изменении концентрации, следует, что  $\nu = 1$ .

Будем пересекать критическую область справа налево вдоль линии  $T = \text{const}$  (линия  $aa$  на рис.1). Пока квантовая поправка относительно мала, диффузия электронов происходит в результате рассеяния на примесях. Поэтому входящий в  $L_{ee}$  коэффициент диффузии  $D$  не зависит от температуры. Но когда мы зайдем в критическую область,  $\sigma_0$  превратится в  $(e^2/\hbar)\xi^{-1}$  и начнет быстро уменьшаться. В этих условиях  $D$  перестанет быть константой: диффузия будет происходить как бы на тех самых флуктуациях электромагнитного поля, которые определяют  $L_{ee}$ , и потому станет температурозависящей. Тогда можно написать систему уравнений для функций  $\sigma(T)$  и  $D(T)$ , используя в качестве второго уравнения соотношение Эйнштейна:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{\xi} + \sqrt{\frac{T}{\hbar D}} \right) \\ \sigma &= e^2 g_F D \end{aligned} \quad (20)$$

( $g_F$  - плотность состояний на ферми-уровне). Исключим  $D$  из этих двух уравнений. Затем разрешим оставшееся уравнение относительно  $\sigma(T)$ , воспользовавшись тем, что мы находимся достаточно близко к переходу и что  $1/\xi \ll 1/L_{ee}$ . Получим температурную зависимость проводимости:

$$\sigma(T) = \frac{e^2}{\hbar} \left( \frac{1}{\xi} + (Tg_F)^{1/3} \right) \equiv \alpha + \beta T^{1/3} \quad (21)$$

Точно на переходе  $\xi = \infty$ ,  $\alpha = 0$ .

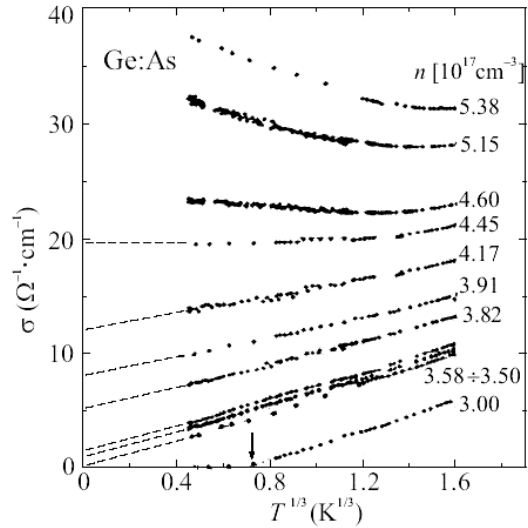


Рис.2. Температурная зависимость проводимости серии образцов Ge:As с разным уровнем легирования в районе перехода металл-изолятор, [9]

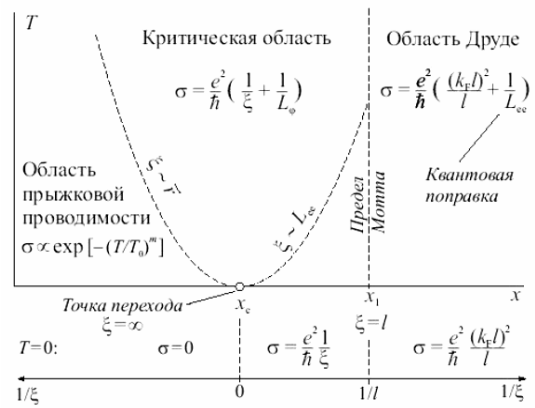


Рис. 3: Окружность перехода металл-изолятор в 3D-системе на фазовой плоскости  $(x, T)$ , где  $x \propto (1/\xi)$  - управляющий параметр. Внизу параллельно оси  $x$  добавлена шкала обратной длины с нулем в точке перехода и положительными значениями переменной  $1/\xi$  в обе стороны от нуля. Там же указаны значения проводимости  $\sigma(T = 0)$  в соответствующих областях. В осях  $(1/\xi, T)$  обе пунктирные кривые на диаграмме это кубические параболы.

Наконец, определим границы критической области. Подставляя в уравнение (12) для границ критической области величину  $L_{ee}$ , полученную из сравнения уравнений (17) и (21), и величину  $\bar{r}$  из уравнения (15), получим

$$T \propto \xi^{-3} \quad (22)$$

в соответствии с тем, что критический индекс  $z = 3$ .

Таким образом, обработка эксперимента [9],

представленного на рис.2, показывает, что критические индексы равны  $\nu = 1$  и  $z = 3$ , а границы критической области описываются кубическими парабололами. Все результаты сведены на диаграмм сведены на диаграмме Работа была поддержана грантом НШ-2170.2003.2.

- 
- [1]. S.L.Sondhi, S.M.Girvin, J.P.Carini, and D.Shahar, Continuous quantum phase transitions, Rev. Mod. Phys. 69, 315 (1997).
- [2]. S.Sachdev, Quantum Phase Transitions (Cambridge University Press, Cambridge 2000).
- [3]. E.Abrahams, P.W.Anderson, D.C.Licciardello, and T.W.Ramakrishnan, Phys.Rev.Lett. 42, 673 (1979).
- [4]. P.A.Lee, T.V.Ramakrishnan, Disordered electronic systems, Rev. Mod. Phys. 57, 287 (1985).
- [5]. Y.Imry, J.Appl.Phys. 52, 1817 (1981).
- [6]. Y.Imry and Z.Ovadyahu, J.Phys. C15, L327 (1981)
- [7]. B.I.Altshuler and A.G.Aronov. Electron-electron interaction in disordered conductors, in Electron-electron interactions in disordered systems. (Eds.:A.L.Efros and M.Pollak). North-Holland, 1985.
- [8]. M.P.A.Fisher, P.B.Weichman, G.Grinshtein, and D.S.Fisher, Phys.Rev. B 40, 546 (1989).
- [9]. I.Shlimak, M.Kaveh, R.Ussyshkin, et al., Phys. Rev.Lett. 77, 1103 (1996).
- [10]. I.Shlimak, M.Kaveh, R.Ussyshkin, et al., J. Phys.: Cond. Matt. 9, 9873 (1997).