

Кроссовер между критическими ансамблями на переходе металл-диэлектрик, управляемый магнитным потоком

Magnetic flux driven crossover between critical ensembles at the metal-insulator transition

Жарекешев И.Х.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы (E-mail: isa2020@mail.ru)

Металл-диэлектрик өткелінде ортогоналды статистикалық сынаудан біртұтас статисталық сынауға дейінгі кроссовер зерттелді. Ол Ааронов-Бом магниттік ағынымен бақыланады. Сынау нүктесінде спектралдық корреляция тек қана фундаменталдық симметриямен анықталатындығын көрсетті. Бұл өзгеру сипаты металдық фазаға ұқсас. Ааронов-Бом ағынына тәуелді кроссовер сынау ансамблінің сипаттамасы болып табылады.

A crossover from critical orthogonal to critical unitary statistics at the disorder induced metal-insulator transition is investigated. It is controlled by Aharonov-Bohm flux and is scale-independent. We show that at the critical point the spectral correlations are determined solely by fundamental symmetries. This behavior is similar to the metallic phase. The Aharonov-Bohm flux dependent crossover is peculiar for the critical ensembles.

1. Введение

Общепринято, что по аналогии с классическими фазовыми переходами критическое поведение перехода металл-изолятор (ПМИ), вызванного разупорядочением потенциала примесных центров, определяется фундаментальной симметрией. Это вывод верен не только для критического показателя длины локализации и проводимости на постоянном токе, но и для статистических свойств собственных значений энергии и волновых функций. Открытие нового критического класса универсальности спектральных корреляций [1, 2] мотивировало пересмотр сегодняшних представлений о квантовой локализации. Теории случайных матриц (RMT) [3] дают общее статистическое описание флуктуаций и корреляций собственных значений в металлической фазе [4].

Соответствующая им универсальная статистика уровней энергии зависит только от фундаментальной симметрии изучаемой системы. Для симметрии, которая инвариантна по отношению к обращению знака времени, могут существовать ортогональный (GOE) и симплектический (GSE) гауссовы ансамбли, тогда как в случае нарушенной симметрии относительно обращения времени только унитарные гауссовы ансамбли (GUE) описывают статистику уровней. В отличие от металлического режима, уровни энергии некоррелированных локализованных состояний электронов в диэлектрическом режиме характеризуются статистикой Пуассона, которая нечувствительна к симметрии. Под симметрией здесь и далее в статье понимается фундаментальная инвариантность (независимость) по отношению к внешним или внутренним параметрам задачи. Здесь также необходимо отметить, что статистика уровней энергии в критической точке ПМИ существенно зависит от пространственной размерности исследуемого твердого тела.

Ранее критическая статистика была найдена не только в трехмерной системе при наличии симметрии относительно обращения времени [1, 5, 6], но и в двумерной симплектической системе [7, 8], где спиновая вращательная инвариантность (спиновая симметрия) нарушается, но при этом симметрия по отношению к изменению знака времени сохраняется. В обоих случаях критическая статистика уровней для малых межуровневых интервалов s соответствует распределению энергетических уровней, характерному для металлической фазы. Распределение плотности вероятности $P_c(s)$ для нормированных межуровневых интервалов:

$$s = |E_n - E_{n+1}|/\Delta, \quad (1)$$

пропорционально s^β для малых интервалов s , где $\beta=1$ для ортогонального или $\beta=4$ для симплектического случая. В выражении (1) энергии E_n и E_{n+1} являются последовательными собственными значениями, а Δ есть среднее расстояние между ближайшими соседними уровнями энергии (спэйсинг). Эта пропорциональность отражает отталкивание между уровнями энергии электрона благодаря сильному квантово-механическому перекрытию соответствующих волновых функций собственных состояний.

Из полученного результата в критической точке перехода металл-изолятор, а также из универсального поведения в металлической фазе для всех возможных симметрий (т.е. для ансамблей GOE, GUE и GSE) логично предположить, что функция $P_c(s) \sim s^\beta$ с параметром отталкивания β в показателе степени, который равен $\beta=2$ для критического унитарного случая, т.е. когда симметрия по отношению к обращению знака времени, нарушена. Обратим внимание на тот факт, что указанная «временная» симметрия в случаях $\beta=1$ и $\beta=4$ не нарушена.

В [9] было выдвинуто предположение, что критическая статистика уровней не зависит от того, нарушена или не нарушена симметрия по отношению к обращению времени. Другими словами, критическая статистика уровней энергии инвариантна к унитарности. Авторы этой работы основывались на результатах проведенного ими численного моделирования для статистики Δ_3 и для распределения плотности вероятности $P_c(s)$ нормированных межуровневых интервалов в критической точке перехода Андерсона. Их неожиданный результат, на первый взгляд, подтверждает вывод из работы [10] о том, что критическая экспонента ν длины локализации не изменяется под действием магнитного поля.

Поэтому, ввиду важности последствий вышеуказанной инвариантности для общих теорий, имеющих дело с фазовым переходом металл-диэлектрик, представляется необходимым провести более тщательное и комплексное исследование статистики уровней энергии на переходе металл-изолятор. В этой статье мы представляем результаты аналитических подходов и компьютерного моделирования, которые однозначно демонстрируют, что существует масштабно-независимый кроссовер между критической ортогональной статистикой и критической унитарной статистикой, который контролируется величиной приложенного магнитного потока.

2. Эффекты, нарушающие симметрию по отношению ко времени

Существует ряд эффектов, которые могут нарушить симметрию задачи по отношению к обращению знака времени. Первый эффект возникает вследствие наложения магнитного потока Ааронова-Бома. Его можно смоделировать, используя гамильтониан, включающий фазу электрона. Соответствующая ему модель называется моделью потока Ааронова-Бома. Для общности наших выводов, кроме этой модели мы также будем рассматривать два других механизма, которые тоже приводят к нарушению симметрии задачи по отношению к обращению знака времени, а именно наложение внешнего постоянного магнитного поля и пространственно-флуктуирующего магнитного потока с нулевым средним значением его напряженности. Последний механизм может описываться так называемой моделью случайного потока (*random flux model*).

Для всех трех механизмов нарушения временной симметрии мы исследовали предельную критическую унитарную статистику энергетических уровней и нашли, что функции распределения $P_c^u(s)$ межуровневых расстояний являются одинаковыми для всех трех случаев. Кроме того, наши результаты однозначно показывают, что существует критическая статистика унитарной симметрии для трехмерных неупорядоченных твердых тел, которая значительно отличается от критической ортогональной статистики. Эта неортогональная статистика относится к *критической унитарной статистике*.

Динамика невзаимодействующих электронов в трехмерной неупорядоченной системе в присутствии процессов, которые разрушают симметрию задачи по отношению к обращению знака времени, может быть исследована с применением широкоизвестной модели Андерсона. Модель Андерсона хорошо подходит для описания явления фазового перехода металл-диэлектрик, который относится к типичным критическим явлениям в статистической физике. Она может быть представлена следующим гамильтонианом в форме вторичного квантования:

$$H = \sum_r \epsilon_r |r\rangle\langle r| + \sum_{\Delta} t_{r, r+\Delta} |r\rangle\langle r+\Delta|. \quad (2)$$

В формуле (2) векторы r обозначают узлы простой кубической решетки, постоянная решетки обозначается через a . Периодические граничные условия наложены по всем трем направлениям. Некоррелированные затравочные энергии ϵ_r узлов решетки распределены с постоянной плотностью вероятности в интервале $[-W/2, W/2]$, где параметр W характеризует степень разупорядочения примесного потенциала. Случайные энергии ϵ_r расположены по диагонали матрицы. Недиагональные матричные элементы $t_{r, r+\Delta}$ в формуле (2) соответствуют квантовым переходам между ближайшими соседними узлами и равны интегралам перекрытия между узельными состояниями $t_{r, r+\Delta} = V_{r, r+\Delta}$. Только они содержат члены, отвечающие несохранению симметрии.

Рассмотрим в аналитической форме три типа процессов, нарушающих симметрию задачи по отношению к обращению знака времени, о которых говорилось выше в статье.

а) Приложение постоянного магнитного поля напряженностью B . В этом случае интеграл перекрытия имеет вид

$$V_{r,r^*} = V \exp(\pm i 2\pi a n), \text{ если } r - r^* = \pm e_x. \quad (3)$$

Здесь $r e_y = n$, где n — целые числа, а e_x, e_y, e_z — элементарные единичные вектора декартовой системы координат x, y, z . Положения атомных узлов в решетке задаются вектором $r = (x, y, z)$. Во всех других случаях межузельных связей мы имеем $V_{r,r^*} = V$ без фазового фактора.

Параметр $\alpha = eBa^2/h$ соответствует магнитному полю. Внешнее поле, таким образом, входит в задачу только через фазовый фактор интеграла перекрытия. Причем величина магнитного поля B выбрана так, чтобы параметр α (который пропорционален напряженности B) был соизмерим с постоянной решетки. Для того чтобы сделать задачу безразмерной, здесь и далее в статье параметр V принят для удобства за единицу энергии. Расположение межузельных связей, которые содержат фазовый фактор, и линий магнитного потока на примере двумерной решетки показано на рисунке 1.

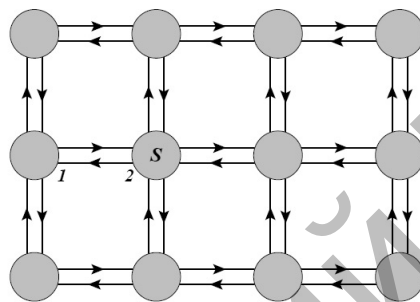


Рис. 1. Схематическое изображение связей между узлами S двумерной решетки и расположение фаз (указано стрелками) для «собирания» магнитного потока через каждый плакет для случая (а). Один плакет содержит четыре межузельные связи

б) Приложение случайного магнитного потока

$$V_{r,r^*} = -V \exp(2\pi i \theta_{r,r^*}), \quad (4)$$

где значения хаотических фаз θ_{r,r^*} выбираются из интервала $[-\theta/2, \theta/2]$ с однородным распределением плотности вероятности $p(\theta_{r,r^*}) = 1/\theta$.

в) Приложение постоянного магнитного потока (модель потока Ааронова-Бома)

$$V_{r,r^*} = -V \exp(\pm 2\pi i \varphi_{AB} a/L), \quad (5)$$

где L — линейный размер исследуемой системы; $\varphi_{AB} = \varphi \varphi_0$ — величина потока Ааронова-Бома. Она равна φ , если записывать в единицах элементарного кванта магнитного потока $\varphi_0 = h/e$.

Для того, чтобы провести численное моделирование в вышеуказанных трех случаях, энергии электронов, соответствующие собственным значениям гамильтониана (2), содержащего до 8000 узлов решетки, получены методом прямой диагонализации с использованием алгоритма Ланцоша для больших матриц [11]. Для ряда частных случаев также применяется метод деления конечных интервалов (метод децимации) [12]. Все вычисления проводились в узких зонах энергий, центрированных вокруг точки спектра $E/V=0$. При этом диагонализация каждой реализации содержала от 6 до 30 % всех собственных значений матрицы, в зависимости от выбранной ширины зоны. В последующих этапах блок-схемы строилась гистограмма для распределения межузельных интервалов, которая не зависела от выбора зоны и ее размера. Таким образом, мы установили и проверили независимость полученных результатов от ширины зоны.

Число реализаций, которые диагонализировались, выбиралось зависящим от размеров системы, причем таким образом, чтобы полное число собственных значений достигало 10^6 для линейных размеров $L/a=5$ системы и 10^5 для $L/a=10,20$, соответственно. Была проведена корректная процедура «выпрямления» энергетического спектра (*unfolding*) с целью компенсировать крупномасштабные вариации в плотности состояний. Наконец, вычислялась нормированная функция плотности вероятности межузельных расстояний $P_c(s)$ в критической точке ПМИ при определенных значениях беспорядка W . Наши результаты показали, что статистика уровней на переходе металл-изолятор не зависит от размеров системы как для случая (б), так и для случая (в). А именно, в пределах контролируемой

нами погрешности распределение межуровневых расстояний не изменяется, если размер системы увеличивается от $L/a=5$ до $L/a=20$. Отметим, что функция $P_c(s)$ достаточно хорошо описывает мелкомасштабную структуру спектра энергии и полностью отражает эффект квантово-механического отталкивания между электронными уровнями энергии при $s \rightarrow 0$.

3. Критическая унитарная статистика и функции распределения $P_{cu}(s)$

В присутствии «временной» симметрии критический беспорядок в центре зоны равен $W_c/V=16,4$ [13]. Это значение разделяет зону локализованных состояний (при $W > W_c$) от зоны распространенных «металлических» состояний (при $W < W_c$). Было установлено [14], что это значение критического беспорядка не изменяется, если приложить магнитный поток Ааронова-Бома произвольной величины. В противоположность этому, параметр беспорядка W_c увеличивается, если увеличивается напряженность приложенного внешнего магнитного поля [10, 15, 16]. Обсудим результаты, полученные для случая (а), то есть для трехмерной модели Андерсона с приложенным сильным постоянным магнитным полем B , таким что $\alpha = eBa^2/h = 1/5$. Это соответствует одной пятой кванта магнитного потока на один плакет решетки. Параметр критической степени беспорядка в этом случае равен $W_c/V = 18,1$ [10].

При этом никакой зависимости функции распределения межуровневых расстояний $P_c(s)$ от размеров системы не было обнаружено (в пределах статистической погрешности измерений) для $L/a=5, 10$ и 20 , как и ожидается для критических ансамблей. Аналогичные результаты были получены для напряженностей магнитного поля, соответствующих $\alpha=1/4, 1/10$ и $1/20$. Наши вычисления критического распределения $P_c^u(s)$ в присутствии однородного магнитного поля сравнивались с данными по критической статистике без магнитного поля. При этом наблюдалось явное отличие не только в высоте максимумов распределения, но и в поведении функции при малых значениях интервалов s . Это отличие намного больше, чем пренебрежимые флуктуации в численно полученных распределениях. Важно отметить, что поведение функции $P_c(s)$ при малых s является квадратичным, как и ожидается в унитарном случае. Найденная параболичность существенно отличается от линейной зависимости $P_c(s)$, которая справедлива в критическом ортогональном ансамбле. Этот факт резко противоречит выводам авторов работ [6, 9]. Проведем интерполяцию наших численных данных по формуле, предложенной в работе [17], для критического распределения спэйсингов:

$$P_{AKL}(s) = As^{\nu} \exp(-Bs^{\gamma}); \quad \gamma = 1 + 1/\nu d, \quad (6)$$

где ν — критическая экспонента длины локализации и d — евклидова размерность. В то время, как наши данные можно интерполировать формулой (6) в области наиболее вероятных спэйсингов с $\nu \sim 1,2$ (что приводит к разумному значению критического показателя $\nu = 1,7$), отклонения в области больших спэйсингов остаются все же нескомпенсированными и, как следствие, не описываются выражением (6). Поэтому очевидно, что такой выбор параметров интерполяции неприемлем. Рассматривая отдельно только асимптотику, заметим, что поведение на больших спэйсингах отлично характеризуется простым экспоненциальным спадом:

$$P_c^u(s) \sim \exp(-\kappa s), \quad (7)$$

где $\kappa=1,9$. Такая функциональная форма и скорость экспоненциального спада к очень похожи на случай критической ортогональной статистики [18]. Обратим внимание, что аналогичное асимптотическое выражение было ранее найдено для двумерных симплектических систем [7].

3. Кроссовер между критическими ансамблями и расчет статистики Δ_3

Мы также провели численное моделирование статистики Δ_3 , которую ввел Мета в [3]. Она измеряет спектральную жесткость и характеризует структуру энергетического спектра по обширному диапазону масштабов энергии. Эта статистика определяется как среднеквадратичное отклонение интегральной плотности состояний $N(E)$ от линейного роста, усредненное по ширине интервала k энергий с центром интервала в точке спектра E

$$\Delta_3(k) = \left\langle \min_{A,B} \frac{1}{k} \int_{-k/2}^{k/2} [N(E + \varepsilon) - A - B\varepsilon]^2 d\varepsilon \right\rangle, \quad (8)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю случайных реализаций. Полученный нами результат показан на рисунке 2.

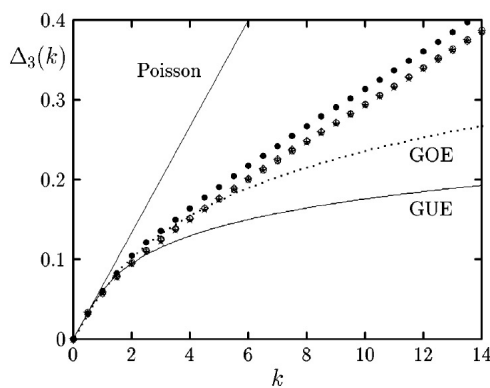


Рис. 2. Статистика Δ_3 как функция интервала энергии k для критического унитарного ансамбля ($Wc/V=18,1$ и $\alpha=0,2$). Различными символам соответствуют различные размеры системы: $L/a=5$ (\diamond), $L/a=10$ (*), и $L/a=20$ (\circ). Для сравнения приведен результат для критического ортогонального ансамбля $L/a=20$ (\bullet). Различными линиями показаны также известные результаты для изолирующего режима (кривая Пуассона) и для металлического режима (GOE и GUE)

Для энергетического интервала вблизи критической точки перехода металл-изолятор статистика Δ_3 не зависит от размеров изучаемой системы, так же как и для случая с распределением $P_c^u(s)$. Жесткость спектра в критическом унитарном ансамбле увеличивается по сравнению с критическим ортогональным ансамблем. Разница между этими двумя критическими кривыми является существенно больше погрешности, но, в то же время, меньше, чем разница между GOE и GUE. В металлическом режиме магнитное поле, как известно, делает энергетический спектр более жестким (менее сжимаемым) [18]. Однако указанный полевой эффект ослабевает в критической области ПМИ из-за увеличения степени беспорядка W .

Таким образом, результаты как для $P_c^u(s)$, так и для статистики Δ_3 , однозначно указывают на существование критической унитарной статистики в случае приложенного сильного магнитного поля. Для того, чтобы исследовать влияние слабого магнитного поля на такое поведение статистики, необходимо рассмотреть другую модель, отличную от случаев (а) и (в), поскольку условие соизмеримости требует бесконечных размеров системы по мере того, как $B \rightarrow 0$ [19–21]. Следовательно, в дополнении к предыдущим моделям целесообразно использовать также модель случайного потока (б), которая позволяет изучить эффект слабых локальных магнитных полей, причем глобальное магнитное поле остается равным нулю. Более подробное исследование этого случая будет освещено в будущей работе.

5. Обсуждение и заключение

Из полученных результатов следует, что при увеличении магнитного потока статистика уровней энергии неупорядоченной системы изменяется от критической ортогональной к критической унитарной статистике. Причем исследуемая трехмерная система всегда остается в критическом состоянии, то есть точно в точке перехода металл-диэлектрик. При малых энергиях статистика спектральных корреляций определяется исключительно фундаментальной симметрией критических ансамблей (например, в терминах параметра отталкивания β). Обобщая полученные данные, вполне логично заключить, что указанный выше переход, который может управляться магнитным потоком Ааронова-Бома, является характерной особенностью всех критических ансамблей.

В работе были исследованы статистические свойства уровней энергии электронов в трехмерной модели Андерсона, когда симметрия по отношению к изменению знака времени не сохраняется. Нарушение этой симметрии происходит из-за приложения постоянного магнитного поля или потока Ааронова-Бома. Нами была найдена новая критическая унитарная статистика, которая принципиально отличается от критической ортогональной статистики, подробно изученной ранее в работах автора [22–24]. На основе компьютерных вычислений показано существование масштабно-инвариантного кроссовера критической статистики, управляемой величиной внешнего магнитного потока [25–27]. Данный кроссовер характерен для такого критического явления как переход металл-изолятор.

References

1. *Shklovskii B.I., Shapiro B. et al.* Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47. — P. 11487–11490.
2. *Kravtsov V.E., Lerner I.V., Altshuler B.L., Aronov A.G.* Universal spectral correlations at the mobility edge // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 72. — P. 888–891.
3. *Mehta M.L.* *Random Matrices.* — Boston: Academic Press, 1991. — 532 p.
4. *Efetov K.B.* *Supersymmetry in Disorder and Chaos.* — Cambridge: Cambridge University, 1997. — 540 p.
5. *Zharekeshev I.Kh., Kramer B.* Scaling of level statistics at the disorder-induced metal-insulator transition // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 51. — P. 17239–17242.
6. *Braun D., Montambaux G.* Spectral correlations from the metal to the mobility edge // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52. — P. 13903–13909.
7. *Schweitzer L., Zharekeshev I.Kh.* Critical level spacing distribution of two-dimensional disordered systems with spin-orbit coupling // *J.Phys.: Condens. Matter.* — 1995. — Vol. 7. — P. L377–L382.
8. *Evangelou S.N.* Level-spacing function $P(S)$ at the mobility edge // *Phys. Rev. B.* — 1994. — Vol. 49. — P. 16805–16808.
9. *Hofstetter E., Schreiber M.* Does Broken Time Reversal Symmetry Modify the Critical Behavior at the Metal-Insulator Transition in 3-Dimensional Disordered Systems // *Phys. Rev. Lett.* — 1994. — Vol. 73. — P. 3137–3140.
10. *Ohtsuki T., Kramer B., Ono Y.* Anderson transition in 3-dimensional systems in strong magnetic fields // *J.Phys. Soc. Jpn.* — 1993. — Vol. 62. — P. 224–238.
11. *Lee P.A.* Real-Space Scaling Studies of Localization // *Phys. Rev. Lett.* — 1979. — Vol. 42. — P. 1492–1495.
12. *Batsch M., Zharekeshev I.Kh, Kramer B.* Decimation algorithm for the statistics of energy levels // *Sol. State Commun.* — 1995. — Vol. 95. — P. 353–356.
13. *Hofstetter E., Schreiber M.* Statistical properties of the eigenvalue spectrum of the three-dimensional Anderson Hamiltonian // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 48. — P. 16979–16985.
14. *MacKinnon A.* Critical exponents for the metal-insulator transition // *J.Phys.: Condens. Matter.* — 1994. — Vol. 6. — P. 2511–2516.
15. *Khmel'nitskii D.A., Larkin A.I.* Mobility edge shift in external magnetic field // *Sol. State Commun.* — 1981. — Vol. 39. — P. 1069–1070.
16. *Shapiro B.* Anderson transition in a magnetic field. A possible phase diagram // *Phil. Mag. B.* — 1984. — Vol. 50. — P. 241–250.
17. *Aronov A.G., Kravtsov V.E., Lerner I.V.* Level spacing distribution near the Anderson transition // *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* — 1994. — Vol. 59. — № 1. — P. 40–45.
18. *Zharekeshev I.Kh., Kramer B.* Universal fluctuations in spectra of disordered systems at the Anderson transition // *Japanese Journal of Applied Physics.* — 1995. — Vol. 34 (8 B). — P. 78–81.
19. *Berry M.V., Robnik M.* Statistics of energy levels without time reversal symmetry: Aharonov-Bohm chaotic billiards // *J.Phys. A.* — 1986. — Vol. 19. — P. 649–668.
20. *Robnik M., Berry M.V.* False time-reversal violation and energy level statistics: The role of antiunitary symmetries // *J.Phys. A.* — 1986. — Vol. 19. — P. 669–690.
21. *Dupuis N., Montambaux G.* Aharonov-Bohm flux and statistics of energy levels in metals // *Phys. Rev. B.* — 1991. — Vol. 43. — P. 14390–14395.
22. *Zharekeshev I.Kh.* Critical statistical ensembles in quantum nanosystems at the localization transition // *Zhurnal of problems of open systems evolution.* — 2010. — Vol. 1. — № 2. — P. 8–13.
23. *Zharekeshev I.Kh.* Critical statistics of energy levels in disordered systems: I. Orthogonal symmetry class // *Vestnik KazNU. Ser. fizicheskaya.* — 2011. — Vol. 36. — № 1. — P. 37–45.
24. *Zharekeshev I.Kh.* Critical statistics of energy levels in disordered systems: II. Unitary symmetry class // *Vestnik KazNU. Ser. fizicheskaya.* — 2011. — Vol. 36. — № 1. — P. 46–50.
25. *Zharekeshev I.Kh.* Probability of the Level Number in a Given Energy Interval in Disordered Quantum Systems // *Eurasian Physical Technical J.* — 2010. — Vol. 7. — № 1 (13). — P. 56–60.
26. *Zharekeshev I.Kh.* Universal statistics of energy levels at the metal-insulator transition. — 2009. — Vol. 31. — № 4. — P. 56–60.
27. *Zharekeshev I.Kh.* Algorithm of division for spectral correlations // *Vestnik KSU Seriya Fizika.* — 2010. — Vol. 57. — № 1. — P. 9–13.