

КРИТИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ: II. УНИТАРНЫЙ КЛАСС СИММЕТРИИ

И.Х. Жарекешев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы

В присутствии магнитного поля изучены статистические свойства дискретных уровней электронных состояний вблизи перехода Андерсона. Для трехмерных неупорядоченных нанокластеров показано, что критическая унитарная статистика отличается от критической ортогональной статистики.

Теория хаотических матриц [1] обеспечила общее понимание в статистическом смысле флуктуационных явлений в проводимости неупорядоченных электронных систем. Она позволила провести статистико-вероятностное описание корреляций в спектрах и в амплитудах волновых функций на металлической стороне фазового перехода металл-изолятор. В противоположность металлической фазе, статистика уровней на диэлектрической стороне подчиняется закону Пуассона, справедливому для абсолютно хаотичному распределению полностью независимых переменных. Универсальная статистика уровней энергии, соответствующая критической точке перехода между металлической и диэлектрической фазами, зависит от базовой симметрии рассматриваемой системы.

По аналогии с классическими фазовыми переходами принято считать, что критическое поведение на переходе проводник-изолятор, вызванном разупорядочением в пространственном расположении примесных атомов также определяется особенностями фундаментальной симметрии. Этот факт является справедливым не только для критического показателя длины локализации и статической электронной проводимости, но и для статистических свойств дискретного энергетического спектра. Открытие нового критического класса универсальности спектральных корреляций является этому факту ярким и убедительным подтверждением. Оно расширило понимание критического явления, как переход локализация-делокализация, исследование которого является важным в современной физике конденсированного состояния. Ранее в работе [2] размерная независимость критической статистики была установлена для ортогонального случая, то есть в условиях отсутствия магнитного поля и отсутствия спин-орбитального взаимодействия. Полученные там результаты подтвердили наличие критической ортогональной статистики уровней энергии. В металлической фазе для симметрии с временной реверсией характерны два случая, а именно, ортогональный гауссовый ансамбль (GOE) и симплектический гауссовый ансамбль (GSE). Первый случай в условиях критичности мы обсудили в предыдущей статье предлагаемой серии, в то время как последний будет рассмотрен в предстоящих исследованиях.

В настоящей работе представлены результаты компьютерного изучения, которые демонстрируют существование не только критической ортогональной статистики уровней энергии (COE), но и также существование критической унитарной статистики (CUE), которая является масштабно-инвариантной, то есть независимой от размеров образца. Это означает, что в пределе бесконечных размеров исследуемой системы (фактически в термодинамическом пределе) инвариантность CUE-статистики сохраняется. Последнее свойство подчеркивает универсальность унитарной статистики, которая обусловлена нарушением симметрии по отношению к обращению времени. Такое нарушение симметрии вызывается наложением на исследуемую неупорядоченную систему сильного магнитного поля.

Динамика невзаимодействующих электронов, движущихся независимо друг от друга в статическом поле неупорядоченных примесных атомов в присутствии процессов, которые

разрушают временную симметрию, могут быть исследованы с помощью обобщенного гамильтониана Андерсона:

$$H = \sum_{n\sigma} \varepsilon_n a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + \sum_{\langle n,m \rangle, \sigma} t (a_{n\sigma}^+ a_{m\sigma} + a_{n\sigma} a_{m\sigma}^+), \quad (1)$$

где a_n^+ (a_n) – операторы рождения (уничтожения) электрона на узле n решетки; ε_n – энергия узла n , равномерно распределенная в интервале от $-W/2$ до $W/2$, t есть интеграл перекрытия между узлом n и ближайшими к нему в решетке узлами m . Он зависит от магнитного поля B . Величина W количественно определяет степень беспорядка примесного потенциала. В трехмерных системах переход Андерсона в центре зоны наступает при $W_c=16.4$ в единицах интеграла перекрытия. Линейные размеры системы измеряются в единицах постоянной решетки a .

Мы диагонализовали гамильтониан (1) для простых кубических решеток различных размеров от $L=5$ до $L=100$ со следующими граничными условиями

$$\psi(x,y,z=L) = \psi(x,y,z=0) \exp(i\varphi).$$

Для расчетов спектров применялся новый численный метод, специально разработанный для гигантских матриц [3,4]. Данные нашего численного моделирования собраны в таблице 1.

Таблица 1 – Численные параметры различных кубических решеток с линейным размером от $L=5$ до $L=100$. Критический беспорядок выбран для модели с равномерным распределением энергий E_n , $W_c=16.5$

| L | M | N_s | Δ | $\rho(E=0)$ | A_c | α | $(\delta\alpha)$ |
|------------------|----------------|------------|----------------------|----------------------|-------|----------|------------------|
| 5 | $3 \cdot 10^5$ | 18 610 321 | $1.42 \cdot 10^{-1}$ | $5.62 \cdot 10^{-2}$ | 1.90 | 1.01 | (0.02) |
| 8 | $4 \cdot 10^3$ | 1 016 790 | 3.47 | 5.63 | 1.89 | 0.95 | (0.06) |
| 10 | $3 \cdot 10^3$ | 2 576 306 | 1.03 | 5.62 | 1.89 | 0.99 | (0.05) |
| 16 | $5 \cdot 10^2$ | 1 017 902 | $4.34 \cdot 10^{-3}$ | 5.62 | 1.88 | 0.98 | (0.06) |
| 20 | 25 | 99 493 | 2.23 | 5.61 | 1.91 | 1.00 | (0.10) |
| 28 | 10 | 109 075 | $8.11 \cdot 10^{-4}$ | 5.62 | 1.87 | 1.07 | (0.10) |
| 32 | 10 | 163 097 | 5.40 | 5.62 | 1.89 | 0.99 | (0.08) |
| 40 | 5 | 158 658 | 2.77 | 5.62 | 1.91 | 0.97 | (0.09) |
| 64 | 2 | 260 020 | $6.79 \cdot 10^{-5}$ | 5.62 | 1.88 | 1.04 | (0.09) |
| 80 | 1 | 254 321 | 3.47 | 5.62 | 1.92 | 1.02 | (0.06) |
| 100 ^a | 1 | 99 360 | 1.77 | 5.63 | 1.88 | 0.95 | (0.11) |

M – число реализаций, которые были точно диагонализированы;
 N_s – общее число межузловых расстояний;
 Δ – среднее расстояние между уровнями энергии электрона;
 $\rho=(\Delta L^3)^{-1}$ – плотность электронных состояний;
 A_c и α – величины из уравнения (3.12);
 $\delta\alpha$ – статистическая ошибка.
 Все уровни находятся в интервале энергии $|E| < 4.45$.

Магнитным потоком Φ , который пропорционален потоку Ааронова-Бома, управляет фаза граничных условий φ . Численно полученная форма унитарного критического распределения $P^u(s)$, которая соответствует наиболее «унитарной» (то есть максимальной) фазе магнитного потока Ааронова-Бома $\varphi=1/4$, совпадает с функциональной формой $P_c(s)$. Причем последняя форма найдена в присутствии сильного магнитного поля. Она показана на рисунке 1. Отметим, что кроссовер СОЕ–СUE является резким (т.е. происходит скачком), в отличие приложения магнитного поля Ааронова-Бома [5].

Отметим что, поведение критического унитарного распределения $P_c^u(s)$ для малых расстояний s описывается степенным законом:

$$P_c^u(s) = B_c^u s^\beta, \quad B_c^u = 8.5 \pm 0.1 \quad (2)$$

с параметром отталкивания $\beta=2$, что и следовало ожидать для унитарной симметрии.

Интересно отметить, что этот найденный результат находится в прямом противоречии с результатами работы [6], где также проводилась точная численная диагонализация при различных потоках Ааронова-Бома. При этом утверждалось, что $P_c^u(s)$ ведет себя линейно при малых s . Другими словами, параметр отталкивания должен быть равен $\beta=1$, а это соответствовало бы сохранению ортогональности симметрии в присутствии магнитного потока, что является ошибочным выводом, поскольку симметрия гамильтониана по отношению к обращению времени нарушена. Таким образом, для трехмерных неупорядоченных нанокластеров критическая унитарная статистика отличается от критической ортогональной статистики. Этот факт хорошо наблюдается также на рисунке 1.

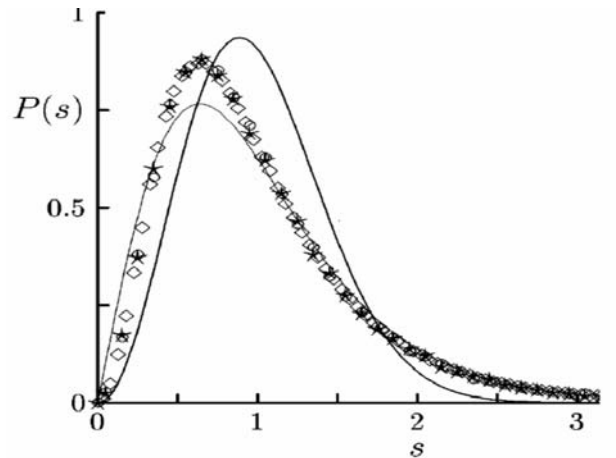


Рис.1. Критическая унитарная функция распределения межуровневых интервалов $P(s)$ в присутствии магнитного поля для трехмерных кубических систем линейных размеров $L/a=5, 10$ и 20 . Для сравнения сплошными линиями показаны также функции распределения для унитарного гауссового ансамбля (4) и критического ортогонального ансамбля (СОЕ)

Асимптотическое выражение для масштабно-инвариантной функции $P_c^u(s)$ при больших энергиях s хорошо аппроксимируется простым экспоненциальным спаданием

$$P_c^u(s) \propto \exp(-A_c^u s), \quad A_c^u = 1.89 \pm 0.1, \quad (3)$$

Спад распределения (3) является значительно более медленным, чем гауссовский хвост, характерный для классического результата, вытекающего из теории хаотических матриц [1]

$$P_{RMT}^u(s) = \frac{32}{\pi} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right). \quad (4)$$

С другой стороны, функция $P_c^u(s)$ ведет себя на больших s аналогично пуассоновскому закону

$$P_p(s) = \exp(-s), \quad (5)$$

справедливого только в сильно локализованном режиме. При этом скорость экспоненциального спада A_c^u почти вдвое больше, чем у пуассоновского хвоста ($A=1$). Отметим также, что коэффициент пропорциональности в формуле (2)

$$B_c^u \approx 2.59 B_{RMT}^u \quad (6)$$

заметно больше, чем у классического гауссового унитарного ансамбля (GUE), что связано с уменьшением отталкивания уровней.

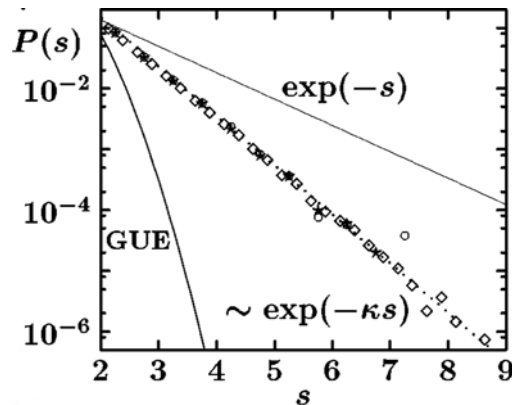


Рис.2. Асимптотическое поведение критической унитарной функции распределения межуровневых интервалов $P(s)$ при больших энергиях s в присутствии магнитного поля для трехмерных кубических систем. Данные для символов и сплошных линий такие же, как и на рисунке 1. Тонкая линия – закон Пуассона (5). Точки аппроксимированы экспоненциальной функцией $\exp(-ks)$ с $\kappa=1.85-1.89$

Заметим, что, в действительности, численное значение скорости спадания в формуле (3) $A_c^u \approx 1.89$ должно рассматриваться как нижняя граница. Это обусловлено тем, что диапазон больших энергий s , который достигается в численных экспериментах, не распространялся на несколько порядков, хотя и был достаточно широким. Аналогичное асимптотическое поведение критического распределения $P_s(s)$ сохраняется также и для неунитарных систем (то есть систем без нарушения инвариантности по отношению к обращению времени). К этим системам принадлежат системы с ортогональной симметрией и с симплектической симметрией, то есть с нарушением инвариантности по отношению к направлению вращения. Изучению этих электронных систем, где важную роль играет сильное спин-орбитальное взаимодействие, будет посвящена заключительная работа в предлагаемой серии.

Литература

1. Brody T.A., Flores J., French J.B. Random matrix physics: spectrum and fluctuations // *Rev. Mod. Phys.* – 1981. – Vol.53, N3. – P. 385-479.
2. 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.
3. Zharekeshev I.Kh. Giant sparse matrix technique for tight-binding models // *Abstr. Meeting of the American Physical Society.* – Indianapolis, 2002. – P. B33.117
4. Жарекешев И.Х. Хаос и порядок в электронных спектрах неупорядоченных систем на переходе металл-изолятор // *Вестник НЯЦ РК.* – 2010. – Т.42, №2. – С. 164-173.
5. Zharekeshev I. Kh., Batsch M., Schweitzer L., Kramer B. Symmetry and level statistics at the Anderson transition // *Proc. Intern. conf. on electron localization and quantum transport in solids.* – Jaszowiec, Poland. – 1996. – P.90-91.
6. 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.

РЕТТЕЛМЕГЕН ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ ЭНЕРГИЯ ДЕҢГЕЙЛЕРІНІҢ КРИТИКАЛЫҚ СТАТИСТИКАСЫ: II. СИММЕТРИЯНЫҢ УНИТАРЛЫҚ КЛАСЫ

И.Х. Жарекешев

Магниттік өрістің қатысуымен дискреттік деңгейлердің Андерсонға ауысу маңайындағы электрондық жағдайларының статистикалық қасиеттері зерттелген. Үшөлшемді реттелмеген нанокластерлерде, критикалық унитарлық статистиканың критикалық ортогоналдық статистикадан айырмашылығы айқындалған.

CRITICAL STATISTICS OF ENERGY LEVEL IN DISORDERED SYSTEMS: II. UNITARY SYMMETRY CLASS

I.Kh. Zharekeshev

The statistical properties of the discrete levels of electron states in the vicinity of the Anderson transition are investigated in the presence of a magnetic field. For three-dimensional disordered nanoclusters the critical unitary statistics is shown to differ from the critical orthogonal statistics.