КРИТИЧЕСКАЯ СТАТИСТИКА УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ: III. СИМПЛЕКТИЧЕСКИЙ КЛАСС СИММЕТРИИ

И.Х. Жарекешев
Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г.Алматы

Рассматривается функция распределения уровней энергии на локализационном переходе, вызванном беспорядком примесного потенциала в присутствии сиплектической симметрии. Установлена квази-пуассоновская асимптотика на больших энергиях, которая оказалась масштабно-инвариантной величиной.

Введение

Мы изучаем статистику электронных уровней со спин-орбитальным взаимодействием в электронной неупорядоченной системе в условиях близких к фазовому переходу металл-изолятор. Квантовые твердые тела с таким типом взаимодействия относятся к системам с симплектической симметрией. Ранее мы рассматривали квантовые системы с ортогональной и унитарной симметрией для критических ансамблей характерных для критической точки перехода Андерсона, вызванного разупорядочением. Применив усовершенствованную модель Андо [1], мы находим численные корреляции в точном одноэлектронном спектре на переходе проводник-изолятор. Основной результат, полученный нами, заключается в том, что плотность вероятности $P(s)$ расстояний между ближайшими уровнями не зависит от размера и имеет совершенно новую форму. Известно, что в металлическом состоянии функция $P(s)$ очень близка к формуле Вигнера, которая соответствует симплектическому классу симметрии хаотического Гамильтониана [2]

$$P_{GSE}(s) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} s^2\right), \tag{1}$$

где s – измеряется в единицах среднего расстояния между уровня энергии электрона. В сильно локализованном режиме спектр энергии полностью некоррелированный и распределение межуровневых расстояний подчиняется закону Пуассона.

$$P_P(s) = \exp(-s). \tag{2}$$

В дополнении к этим двум универсальным распределениям можно ожидать, что существует третья, промежуточная форма $P(s)$, которая соответствует точно переходу проводник-изолятор. Эта новая универсальная статистика, уже была найдена и исследована нами в трехмерном случае, но только без спин-орбитального рассеяния (то есть при $\beta=1$). Аналогичный результат был получен нами для унитарного случая ($\beta=2$), когда симметрия по отношению к обращению времени нарушена наложением внешнего магнитного поля.

Разумно предположить, что аналогичная масштабно-инвариантная универсальность функции $P(s)$ также сохраняется в критической точке двумерной неупорядоченной системы со спин-орбитальным взаимодействием ($\beta=4$). Таким образом, мы расширяем класс универсальности для критического симплектического случая $\beta=4$ и приходим к выводу, что в термодинамическом пределе помимо двух уже известных предельных ситуаций, а именно формулы Вигнера (1) в проводящем режиме и закона Пуассона (2) в изолирующем режиме, существует критическая функция $P(s)$, характеризующая симплектическую симметрию точно на краю подвижности. Следовательно, если $L\rightarrow\infty$, статистика уровней претерпевает непрерывный скачок дважды: сначала система из делокализованного режима идет к критической точке перехода, а потом от перехода в локализованный режим.

Модель вычисления распределения расстояний между уровнями

В предыдущих статьях серии мы не принимали эффекты, связанные со спин-орбитальным взаимодействием. Между тем к гамильтониану электрона в решетке необходимо добавить член

$$\mathrm{H}_{so} = \frac{1}{4m_0^2c^2}\left[\sigma \nabla V(r)\right]\hat{p}, \tag{3}$$

где σ – оператор спина (матрицы Паули); $V(r)$ - потенциальная энергия электрона в поле решетки; c – скорость света. Этот член представляет собой релятивистскую поправку, следующую из уравнения Дирака. В приближении сильной связи эта поправка была учтена для решеточной модели Андо, поэтому здесь мы опустим ее полный вывод.

Чтобы вычислить точную форму критической статистики, мы начинаем с гамильтониана модели Андо, который усовершенствован нами с учетом важного спин-орбитального взаимодействия

$$\mathrm{H} = \sum_{n,\sigma} \varepsilon_{\mathrm{n}} c_{n\sigma}^{+} c_{n\sigma} + \sum_{n,m,\sigma,\sigma'} V(n,\sigma;m,\sigma') c_{n\sigma}^{+} c_{m\sigma'} \tag{4}$$

где $c^{+}_{n\sigma}$ ($c_{n\sigma}$) – операторы рождения (уничтожения) электрона на узле решетки n=(x, y) со спином σ; m – номера узлов решетки, ближайших к узлу n; ε_n – энергии узлов, которые хаотично распределяет вокруг нуля, согласно равномерному распределению с шириной W, параметром определяющим степень беспорядка примесного потенциала; $V(n,\sigma;m,\sigma')=V_x, V_y$ – 2x2 матрицы, элементы которых зависят от направления и описывают прыжковые процессы между ближайшими узлами решетки. Сила спин-орбитального взаимодействия задается параметром энергетического расщепления. Модель (4) более адекватна процессам спинового рассеяния, чем другие модели, так как она симулирует кинетику электронов и их перенос между s–орбиталями посредством рассеяния на p–орбиталях в присутствии спин-орбитального взаимодействия.

Как это обычно делается в теории твердого тела, мы накладываем периодически граничные условия и вычисляем точный дискретный спектр собственных значений (т.е. спектр энергий электрона) с помощью численной процедуры диагонализации, разработанной специально для больших квантовых систем [3]. Она непосредственно была имплементирована, используя усовершенствованный автором метод Ланцоша, для решения задачи на собственные значения гамильтониана (4) [4]. Нами были выбраны квадратные решетки линейных размеров L/a=50 и 100 в интервале энергии [-1,0] и [-0.5,0]. Заметим, внутри этих малых интервалов плотность состояний почти постоянна.

$$\rho = \frac{1}{\Delta L^2} \approx 0.127. \tag{5}$$

Здесь a – постоянная решетки, Δ – среднее расстояние между уровнями. Собственные значения брались из интервалов энергии, принадлежащих критической области, определяемой условием

$$L < \xi(E) = l_0 \left| \frac{E - E_c}{E_c} \right|^{-\nu}, \tag{6}$$

где ξ – длина локализации, которая превышает размер системы L; l_0 – некоторый микроскопический масштаб длин, который порядка упругой длины свободного пробега $l_0 = \upsilon_F \tau_{sc}$.

Установлено, что в модельном гамильтониане (4) полный переход проводник-изолятор происходит при значении степени беспорядка W_c=5.74. Этот беспорядок называется критическим. Полное число полученных в результате диагонализации собственных значений составляло 94672 из 300 реализаций случайного потенциала для размера L=50a и 101744 из 160 реализаций для размера L=100a, соответственно.

На рисунке 1 показана функция распределения $P(s)$ межуровневых расстояний, вычисленная для двух разных размеров системы на переходе проводник-изолятор. Можно видеть из рисунка 1, что независимо от размера системы, которые изменялась вдвое, все численные данные лежат на одной общей кривой $P_c(s)$. При этом критическая функция $P_c(s)$ очень близка к $P_{GSE}(s)$. Отметим точку s_0≈1.63, где две предельные функции $P_{GSE}(s)$ и $P_P(s)$ пересекаются. Похоже, что критическая функция $P_c(s)$ проходит через эту же энергетическую точку. Этот результат приводит к выводу, что энергия s_0=1.63Δ указывает, возможно, на какую-то внутреннюю симметрию, происхождение которой нам пока не известно.

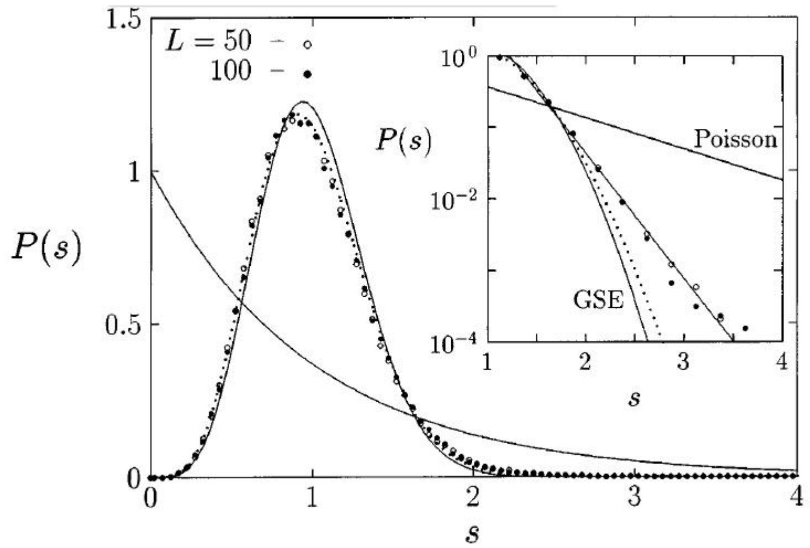

Рис. 1 – Функция распределения интервалов $P(s)$ для двумерной неупорядоченной системы с симплектической симметрией в критической точке перехода проводник-изолятор. L – линейный размер системы: L=50 и L=100; сплошные линии – формула Вигнера $P_{GSE}(s)$ (1) и формула Пуассона $P_P(s)$ (2); пунктирная линия – интерполяция по уравнению (7); вставка – асимптотическое поведение $P(s)$ на больших энергиях s

Как и для всех симплектических систем поведение $P(s)$ на малых спейсингах описывается степенным законом $P(s) \propto s^4$. Интересно отметить, что наш результат по форме критической функции $P(s)$ отличается от результата, полученного ранее другими авторами [5,6] для малых систем. Применим предложенное в работе [7] интерполяционное выражение

$$P(s) = Bs^4 \exp\left(-As^{2-\gamma}\right). \tag{7}$$

Метод наименьших квадратов дает нам следующие коэффициенты

$$A=2.77\pm0.05, \quad B=17.8\pm0.8 \quad \text{и} \quad \gamma=0.28\pm0.03 \tag{8}$$

Используя уровень доверия 95% (α=0.05) для проверки статистической гипотезы в области энергий $0<s<3$ мы получаем χ^2=29.2 из наших численных данных. Это значение меньше, чем ожидаемая оценка $\chi^2{}_\alpha$=6.34. Следовательно, гипотеза, предлагаемая аналитической формулой (7), может быть принята и считается справедливой в пределах относительной ошибки $(\chi^2/N)^{1/2}\approx2.0\%$.

Здесь, однако, необходимо отметить следующее противоречие. Хотя вычисленные нами функции распределения $P_c(s)$ в диапазоне $0<s<3$ хорошо согласуется с аналитической формулой (7), показатель γ=0.28, полученный из интерполяции, дает величину критического индекса длины локализации

$$\nu = \frac{1}{d(1-\gamma)} \approx 0.7,$$

которая сильно отличается от своего истинного значения ν=2.75, известной и проверенной в литературе [8]. Более того, если мы удалимся в область асимптотически больших s, то видно, что наши численные результаты сильно отклоняются от формулы (7) (вставка рисунка 1). Вместо этого, они более успешно описываются следующей зависимостью

$$P(s) \propto \exp(-A_c s), \tag{9}$$

то есть экспоненциальным законом со скоростью спада A_c=4.0±0.2.

Заметим, что этот спад происходит в 4 раза быстрее, чем из закона Пуассона (2) в изолирующем режиме, но зато намного медленнее промежуточной асимптотики (9). Аналогичный асимптотический хвост критического распределения $P_c(s)$ был найден и исследован нами для трехмерных систем без спин-орбитального взаимодействия. Однако там коэффициент для нулевого спин-орбитального взаимодействия A=1.85 почти вдвое меньше, чем с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Этот эффект объясняется тем, что спектр энергий становится более жестким. Другими словами, из-за ограничения степеней свободы, характерных для рассеяния спина электрона на орбиталях атомных остовов в узлах решетки [9] сжимаемость дискретного спектра резко уменьшается.

Асимптотическое поведение на больших энергиях

Для того чтобы уменьшить влияние относительных флуктуаций из-за ограниченного числа случайных реализаций и проанализировать асимптотическое поведение функции распределения более подробно мы рассмотрели полную функцию вероятности

$$I(s) = \int_s^\infty P(s')ds'. \tag{10}$$

Интегрирование означает порцию интервалов, которые больше по величине, чем заданный интервал энергий s. Из условий нормировки ясно, что

$$I(0) = 1 \qquad \text{и} \qquad \int_0^\infty I(s)ds = 1 \tag{11}$$

безотносительно к беспорядку W. В сильно локализованном режиме имеем $I(s)=\exp(-s)$, а $I_{GSE}(s)$ вычисляется из теории хаотических матриц.

На рисунке 2 проведены результаты нашего численного моделирования для критической вероятности $I_s(s)$. Здесь мы снова наблюдаем сильное отклонение от асимптотической формулы (7), особенно при больших энергиях s. Отметим, что форма критической функции $I_s(s)$ не чувствительна к изменению размеров исследуемой системы, как и самой $P(s)$. Простой экспоненциальный хвост соответствует уравнению (9)

$$\ln I(s) = -A_c s + C_c \tag{12}$$

где $A_c \approx 4.0$ и $C_c \approx 3.6$. Подобное поведение видно также на вставке к рисунку 1.

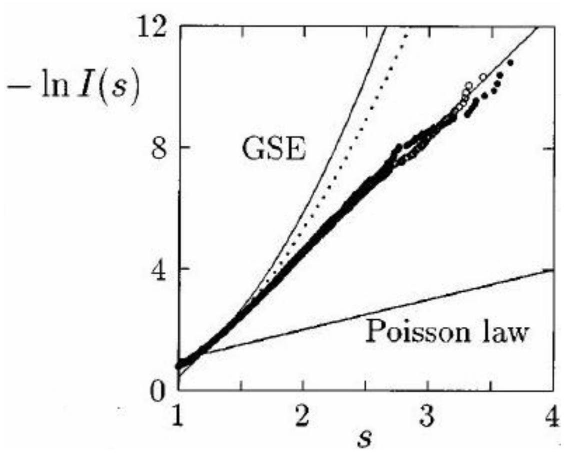

Рис. 2 – Асимптотика интегрированной вероятности $I(s)$ при критическом беспорядке на переходе проводник-изолятор. сплошные линии – $I_{GSE}(s)$ из теории хаотических матриц и $I_P(s)= \exp(-s)$ из закона Пуассона для проводящей и изолирующей фаз, соответственно; пунктирная линия – формула, получена из интерполяции (7); прямая сплошная линия – формула (12)

Мы тщательно проверили, что линейный наклон $\ln I(s)$ в критической точке перехода не зависит от ширины энергетического интервала, из которого берутся дискретные уровни, коль скоро они принадлежат критической области (см. неравенство (6)). В области очень малой вероятности $I(s)<10^{-5}$ при $s>3$ наблюдаются значительные флуктуации, обусловленные уменьшающейся точностью статистических данных для маловероятных событий. Однако, в целом, точность наших вычислений для полной вероятности $I(s)$ все же выше чем для $P(s)$. Следует отметить, что поведение критической функции распределения межуровневых расстояний $P(s)$ не отражает размерность исследуемой системы d, а ее функциональная форма не дает информацию о критическом индексе ν длины локализации.

Заключение

Мы исследуем статистику уровней энергии двумерный электронной системы со спин-орбитальным рассеянием в условиях перехода проводник-изолятор. Вычислена функция распределения расстояний между ближайшими уровнями в критической точке. Показано, что критическая функция распределения является независимой от размера системы и имеет квази-пуассоновский спад на больших энергиях, в явном отличии от гауссовой асимптотической формы, полученной из теории хаотических матриц.

Литература

1. Ando T. Numerical study of symmetry effects on localization in two dimensions // Phys. Rev. B. – 1989. – V.40. – P. 5325-5339.
2. Efetov K.B. Supersymmetry and theory of disordered metals // Adv. Phys. 1983. – Vol.32, N1 – P. 53-127.
3. Писсанецки С. Технология разреженных матриц: / пер. с англ. - М.:. Мир, 1988. - 410 с.
4. Zharekeshev I.Kh, Kramer B., Advanced Lanczos diagonalization for models of quantum disordered systems. *Comp. Phys. Comm*. 1999, - V. 121. - P. 502-506.
5. Katomeris G.N., Evangelou S.N. Critical chaos in 2D disordered systems with spin-orbit coupling // Europhys. Jour. B. – 2000. – Vol.16. – P. 133-136.
6. Evangelou S. N. Anderson transition, scaling, and level statistics in the presence of spin orbit coupling // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.75. – P. 2550-2553.
7. 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. – N1. – P. 40-45.
8. Schweitzer L., Zharekeshev I.Kh. Scaling of level statistics and critical exponent of disordered two-dimensional symplectic systems // J. Phys.: Condens. Matter. – 1997. – Vol.9. – P. L441-L446.
9. Kuemmeth F., Bolotin K.I., Shi S.-F., Ralph D.C. Measurement of discrete energy-level spectra in individual chemically-synthesized gold nanoparticles // Nano Lett. – 2008. – Vol.8, N12. – P. 4506–4512.

РЕТТЕЛМЕГЕН ЖҮЙЕЛЕРДЕГІ ЭНЕРГИЯ ДЕҢГЕЙЛЕРІНІҢ КРИТИКАЛЫҚ СТАТИСТИКАСЫ: III. СИММЕТРИЯНЫҢ СИМПЛЕКТИКАЛЫҚ КЛАСЫ

И.Х. Жарекешев

Энергия деңгейлерінің аралас потенциалдық ретсізделуіне байланысты локализациялық ауысуындағы бөлінуінің критикалық функциясы қарастырылған. Оның масштабты-инвариантты болып табылатын үлкен энергиялардағы квази-пуассоновтық асимптотикасы анықталған.

CRITICAL STATISTICS OF ENERGY LEVEL IN DISORDERED SYSTEMS: III. SYMPLECTIC SYMMETRY CLASS

Isa Kh. Zharekeshev

A critical distribution function of electron energy levels is considered at a localization transition, caused by disorder of the impurity potential in the presence of symplectic symmetry. A quasi-Poisson asymptotic at larger energies is established, which is turned out to be a scale-invariant quantity.