

# ВПЛИВ МАГНЕТНОГО ПОЛЯ НА ЛОКАЛІЗАЦІЮ ЕЛЕКТРОННИХ ЗБУДЖЕНЬ У МОДЕЛІ СИЛЬНОГО ЗВ'ЯЗКУ З ДІАГОНАЛЬНИМ БЕЗЛАДОМ

О. М. Возняк

Прикарпатський університет імені Василя Стефаника, кафедра фізики твердого тіла,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна

(Отримано 12 червня 2001 р.; в остаточному вигляді — 24 жовтня 2001 р.)

Для електронів з діагональним безладом квадратної ґратки в постійному магнетному полі з використанням комп'ютерних методів побудовано замкнуті 4-, 6-, 8-, 10-, 12-, 14-, 16-, 18- і 20-корові шляхи без самоперетинів. Обчислено загальну кількість діаграм із заданою довжиною периметра та розподіл їхніх площ. На основі цих даних побудовано фрагмент локаторного ряду для масового оператора. З використанням методики Паде-апроксимації досліджено умови збіжності цього ряду. Побудовано фазову діаграму локалізації для різних значень магнетного потоку через елементарну комірку. Показано, що магнетне поле зумовлює зменшення ділянки делокалізованих станів як з боку критичних значень енергії, так і з боку критичної величини безладу.

**Ключові слова:** магнетне поле, діагональний безлад, локалізація.

PACS number(s): 72.10.-d, 72.20.-i, 71.30.+h

Електронні системи в магнетному полі характеризуються багатоманітністю фізичних явищ, серед яких найвідомішими є квантовий ефект Гола, мезоскопічні ефекти та вплив квантової інтерференції на низькотемпературну провідність неупорядкованих матеріалів. Цікава також проблема локалізації електронних збуджень у магнетному полі. На цю пору опубліковано значну кількість праць, що стосуються локалізації, індукованої випадковим магнетним полем [1,2]. Відомі також праці, у яких описано делокалізуючий вплив сильного магнетного поля [3]. У деяких роботах чисельними [4–6] та оцінними методами [7] показано, що постійне магнетне поле може сприяти локалізації. У нашій праці, використовуючи стандартну методику Андерсона [8] і комп'ютерний підрахунок розподілу площ діаграм, що відображають розклад масового оператора в локаторний ряд, ми дослідили вплив постійного магнетного поля на локалізацію в квазідвовимірних системах. Ми розглядаємо систему невзаємодіючих електронів з діагональним безладом на кубічній ґратці в постійному магнетному полі, паралельному до одного з кристалографічних напрямків кристала. При такому виборі напрямку поля воно впливає на динаміку електронів лише в кристалографічних площинах, перпендикулярних до напрямку поля. У напрямку ж поля рух електронів не зміниться. Тому фактично аналізуємо двовимірну задачу, гамільтоніан якої з урахуванням переходів лише між найближчими сусідами має вигляд [10]:

$$H = \sum_{i,n} \varepsilon_{i,n} a_{i,n}^+ a_{i,n} + \frac{1}{2} \sum_{i,n} e^{2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0} n} V_1 a_{i+1,n}^+ a_{i,n} + \sum_{i,n} V_2 a_{i,n}^+ a_{i,n+1} + \text{e.c.}, \quad (1)$$

де  $a_{i,n}^+$  ( $a_{i,n}$ ) — оператор породження (знищення) електрона на вузлі  $i$   $n$ -го ланцюжка,  $\varepsilon_{i,n}$  — енергія електрона на  $i$ -му вузлі  $n$ -го ланцюжка,  $V_1$  — матричний елемент переходу між сусідніми вузлами ланцюжків атомів, паралельних до векторного потенціалу магнетного поля,  $V_2$  — матричний елемент переходу між сусідніми вузлами різних ланцюжків атомів,  $\Phi$  — магнетний потік через елементарну комірку квадратної ґратки,  $\Phi_0 = \frac{hc}{e}$  — квант магнетного потоку.

Енергія електрона на вузлі є випадковою величиною, а різні  $\varepsilon_{i,n}$  — незалежні між собою. Їх розподіл задається в моделі Андерсона звичайним чином [9]:

$$P(\varepsilon_{i,n}) = \begin{cases} \frac{1}{2W}, & |\varepsilon_{i,n}| < W, \\ 0, & |\varepsilon_{i,n}| > W. \end{cases} \quad (2)$$

Для дослідження властивостей локалізації електронних збуджень у такій системі зручно використати діагональні елементи вузлової функції Гріна

$$G_{ll}^{mn} = \langle \langle a_{i,n}^+, a_{i,n} \rangle \rangle, \quad (3)$$

яка в енергетичному зображенні визначається співвідношенням

$$G_{l,l}^{n,n}(E) = \frac{1}{E - \varepsilon_l - \Sigma(\mathbf{l}, E)}, \quad (4)$$

де  $\Sigma(\mathbf{l}, E)$  — масовий оператор, що відповідає елек-

тронові на вузлі  $\mathbf{I}(i, n)$ .

Збудження локалізується на вузлі  $\mathbf{I}$ , якщо при  $t \rightarrow \infty$  амплітуда  $G_{ii}(t)$  буде скінченною. Останнє своєю чергою залежить від аналітичних властивостей масового оператора, так що перетворення в нуль його уявної частини при  $E \rightarrow E_0 + i\epsilon$  є необхідною умовою існування збудження з енергією  $E$ , локалізованого на вузлі  $\mathbf{I}$ .

Таким чином, дослідження проблем локалізації мовою функцій Гріна полягає у вивченні аналітичних властивостей масового оператора, для якого використовуємо його зображення у вигляді локаторного ряду

$$\sum (\mathbf{I}, E) = \sum_{l_1} V_{il_1} g_{l_1} V_{l_1 i}$$

$$+ \sum_{l_1, l_2} V_{il_1} g_{l_1} V_{l_1 l_2} g_{l_2} V_{l_2 i} + \dots, \quad (5)$$

де  $g_l = (E - \varepsilon_l)^{-1}$  — локатор, що відповідає вузлові  $\mathbf{I}$ . Графічне зображення цього ряду містить усі шляхи, що починаються у вузлі  $\mathbf{I}$  і повертаються до нього в кінці шляху.

Проте цей ряд має низку недоліків, пов'язаних із розбіжностями, що виникають від урахування множників з малими енергетичними знаменниками та відсутності в ряді правильних аналітичних властивостей, оскільки полюси масового оператора не збігаються з  $\varepsilon_l$ . Виходом із цієї ситуації є виключення із суми ряду членів, що пов'язують однакові вузли  $\mathbf{I}$ . Як наслідок, замість ряду (5), одержують перенормований ряд [11]:

$$\sum (\mathbf{I}, E) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l_1, \dots, l_m} V_{il_1} G_{l_1}^l(E) V_{l_1 l_2} G_{l_2}^{l_1}(E) \dots V_{l_{m-1} l_m} G_{l_m}^{l_1 \dots l_{m-1}}(E) V_{l_m i}, \quad (6)$$

де

$$G_{l_i}^{l_1 \dots l_{i-1}}(E) = \left( E - \varepsilon_l - \sum^{l_1 \dots l_{i-1}} (\mathbf{I}, E) \right)^{-1},$$

а  $\sum^{l_1 \dots l_{i-1}} (\mathbf{I}, E)$  визначається рядом виду (6).

Із виразу (6) виключено ті індекси вузлів, які повторюються, тобто в кожному порядку теорії збурень підсумовування відбувається вздовж шляху без самоперетинів, що починається й закінчується на вузлі  $\mathbf{I}$ . При цьому процеси багатократного розсіювання з поверненням також ураховані введенням  $\sum^{l_1 l_2 \dots} (\mathbf{I}, E)$  у вираз (6), що і забезпечує розгляд лише шляхів без самоперетинів.

Достатньою умовою локалізації збуджень є умова збіжності ряду (6). Оскільки члени ряду містять суми доданків різних знаків, доцільно дослідити абсолютну збіжність перенормованого локаторного ряду. За таких умов збіжність ряду (6) буде принаймні не гіршою від його абсолютної збіжності. При цьому модуль члена порядку  $n + 1$  дасть такий внесок:

$$\left| \sum^n (\mathbf{I}, E) \right| = \left| \sum_{\Gamma_n} T_{\Gamma_n}(E) \right|, \quad (7)$$

у якому підсумовування слід виконати за всіма шляхами без самоперетинів із  $n$  кроків, що починаються й закінчуються на  $\mathbf{I}$ -ому вузлі, а  $T_{\Gamma_n}(E)$  — внесок у

$n$ -й член ряду одного такого шляху —

$$T_{\Gamma_n}(E) = V_{il_1} G_{l_1}^l(E) V_{l_1 l_2} G_{l_2}^{l_1}(E) \dots V_{l_n i}. \quad (8)$$

Під час дослідження збіжності перенормованого ряду виникає питання про розподіл імовірності величин  $\sum^n (\mathbf{I}, E)$  при  $n \rightarrow \infty$ . Уважаючи співмножники в кожному доданку (8) статистично незалежними, одержимо

$$\left| \sum^n (\mathbf{I}, E) \right| = \left| \sum_{\Gamma_n} V_{il_1} \tilde{G}_{l_1}^l(E) V_{l_1 l_2} \tilde{G}_{l_2}^{l_1}(E) \dots V_{l_n i} \right|, \quad (9)$$

де

$$\ln \tilde{G}_l^{l_1 l_2 \dots l_n}(E) = \left\langle \ln \left| \frac{1}{E - \varepsilon_l - \sum^{l_1 \dots l_n} (\mathbf{I}, E)} \right| \right\rangle,$$

а кутові дужки означають усереднення за діагональним безладом.

Для спрощення розрахунків покладемо

$$\tilde{G}_l^{l_1 l_2 \dots l_n}(E) \approx \exp\{-\langle \ln |E - \varepsilon_l| \rangle\}, \quad (10)$$

що, як відомо, мало впливає на кінцевий результат [7]. За відсутності магнетного поля для всіх  $V_{l_1}$  можна прийняти  $V_{l_1} = V$  і дійти до результату Андерсона [8], для одержання якого потрібна інформація лише про повну кількість діаграм заданої довжини периметра і який є точним для ґратки Бете (дерева Кейлі). Для ґратки Бете легко вирахувати повну кількість діаграм заданої довжини, а збіжність ряду пов'язана з коефіцієнтом зв'язності ґратки

$$K = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{N_{n+1}}{N_n}, \quad (11)$$

де  $N_n$  — кількість незалежних замкнутих шляхів довжиною  $n$ . Проте таку ґратку, на жаль, важко реалізувати фізично, оскільки для неї кожен новий крок слід розглядати як такий, що здійснюється в новому вимірі простору нескінченної розмірності. Для ґратки Бете  $K = Z - 1$ .

У реальній ґратці не всі можливі кроки є незалежними, оскільки деякі з них приводять до перетинання гілок дерева і, як наслідок, до утворення циклів. Для уникнення цього необхідно видалити деякі з гілок, що викликають зниження коефіцієнта зв'язності порівняно із ґраткою Бете з такою ж самою кількістю найближчих сусідів. У цьому переважно й полягає уточнення теорії Андерсона для реальної ґратки [12].

Наявність магнетного поля, як відомо, спричиняє виникнення в інтегралах переносу  $V_{l_1}$  додаткового фазового множника, так званого фактора Паєрлса, тоді

$$V_{l_1}^B = V_{l_1} \exp(i\Phi_{l_1}), \quad (12)$$

де  $\Phi_{l_1} = \frac{e}{2\hbar c} \mathbf{B}[\mathbf{R}_l, \mathbf{R}_{l_1}]$ .

Важливою властивістю цих факторів є те, що сума вздовж шляху  $\Gamma_n$  дорівнює потокові магнетного поля  $\mathbf{B}$  через площадку  $S_{\Gamma_n}$ , який охоплюється контуром  $\Gamma_n$  і вимірюється в одиницях кванта магнетного потоку  $\Phi_0$ . Тобто

$$\Phi_{\Gamma_n} = \Phi_{l_1} + \Phi_{l_1 l_2} + \dots + \Phi_{l_{n-1} l} = \Phi_0^{-1} \mathbf{B} S_{\Gamma_n}. \quad (13)$$

Тоді одержимо

$$\sum^n (\mathbf{1}, E) \approx V^{n+1} \left| \sum_{\Gamma_n} \exp(i\Phi_{\Gamma_n}) \right| \times \exp\{-N \langle \ln |E - \varepsilon_k| \rangle\}. \quad (14)$$

Звідси видно, що вплив магнетного поля на локалізацію визначається розподілом площ  $S_{\Gamma_n}$  замкнутих шляхів без самоперетинів заданої довжини. Без детального підрахунку цих площ удається здійснити лише якісний аналіз впливу магнетного поля на локалізацію [7], який ґрунтується на тому, що, згідно

із скейлінговою теорією шляхів без перетинів, середньоквадратичний розмір  $\Gamma_n$  дорівнює

$$\langle R^2 \rangle \sim N^{2\nu} a^2, \quad (15)$$

де  $a$  — постійна ґратки, а  $\nu$  — критичний індекс так званої кореляційної довжини. Для приблизної оцінки середньої площі  $S_{\Gamma_n}$  можна взяти

$$S_{\Gamma_n} \sim \pi \langle R^2 \rangle \sim \pi a^2 N^{2\nu}. \quad (16)$$

Точніший аналіз впливу магнетного поля на локалізацію можна здійснити, лише маючи детальний розподіл площ шляхів без самоперетинів. Уже з якісного аналізу діаграм видно, що найменшу площу мають найбільш витягнуті діаграми. Площа такої діаграми-стовпчика дорівнює  $S_{\Gamma_n}^{\min} = \left(\frac{n}{2} - 1\right) a^2$ . Найбільшу площу охоплюють діаграми квадратної форми, якщо кількість кроків, які її утворюють, кратна чотирьом:  $S_{\Gamma_n}^{\max} = \frac{n^2 a^2}{16}$ . Коли ж кількість кроків діаграми кратна двом, але не кратна чотирьом, то найбільшу площу має прямокутна діаграма з мінімальною різницею між довжинами її сторін. У цьому випадку відповідна площа буде  $S_{\Gamma_n}^{\max} = \left(\frac{n^2 - 4}{16}\right) a^2$ .

Проте детальний розрахунок розподілу площ діаграм, очевидно, може бути здійснений лише комп'ютерними методами. Наші розрахунки базуються на зображенні ґратки за допомогою графа, вершини якого збігаються з її вузлами. Тоді задача побудови діаграм еквівалентна задачі про побудову всіх замкнутих шляхів (циклів), які починаються в деякій фіксованій точці і проходять лише один раз через підмножину вершин графа. А для реалізації цього завдання використано методику побудови шляхів Гамільтона, але без застосування умови обов'язкового проходження їх через кожную з вершин графа. Найпростіший алгоритм, який можна використати з цією метою, полягає в переборі всіх можливих послідовностей вузлів. Він вимагає ґенерування  $n!$  ( $n$  — кількість кроків циклу) різних послідовностей, кожна з яких треба перевірити на предмет того, чи визначає вона відповідний шлях, а це збільшує кількість кроків обчислювальної процедури до величини  $n!n$ .

Ми використали метод, який дає змогу значно скоротити кількість кроків алгоритму і називається алгоритмом з поверненням (backtracking) [13]. Основна ідея методу полягає в тому, що на основі  $n$ -крокової послідовності відшукується такий крок, який дав би  $(n + 1)$ -крокову послідовність. Якщо такого не знайдено, то робиться крок назад і відшукується інший  $n$ -ий крок, який продовжив би послідовність. Роботу цього алгоритму можна проілюструвати процесом пошуку на деякому дереві, кожній вершині якого відповідає певна кількість кроків. Об'єм обчислень за допомогою алгоритму з поверненням хоч і зменшується порівняно з випадком повного перебору, все ж залишається великим і експоненційно зростає зі збільшенням розмірності задачі.

| Кількість кроків $n$ | Площа діаграми $S_{\Gamma_n}(a^2)$ | Кількість діаграм площею $S_{\Gamma_n}$ | Повна кількість діаграм $N_n$ | $(N_{n+2})/2N_n$ |
|----------------------|------------------------------------|---|-------------------------------|------------------|
| 4                    | 1                                  | 8                                       | 8                             | —                |
| 6                    | 2                                  | 24                                      | 24                            | 1.5              |
| 8                    | 3                                  | 96                                      | 112                           | 2.33             |
|                      | 4                                  | 16                                      |                               |                  |
| 10                   | 4                                  | 360                                     | 560                           | 2.5              |
|                      | 5                                  | 160                                     |                               |                  |
|                      | 6                                  | 40                                      |                               |                  |
| 12                   | 5                                  | 1320                                    | 2976                          | 2.66             |
|                      | 6                                  | 960                                     |                               |                  |
|                      | 7                                  | 528                                     |                               |                  |
|                      | 8                                  | 144                                     |                               |                  |
|                      | 9                                  | 24                                      |                               |                  |
| 14                   | 6                                  | 4872                                    | 16464                         | 2.77             |
|                      | 7                                  | 4704                                    |                               |                  |
|                      | 8                                  | 3752                                    |                               |                  |
|                      | 9                                  | 2016                                    |                               |                  |
|                      | 10                                 | 840                                     |                               |                  |
|                      | 11                                 | 224                                     |                               |                  |
| 16                   | 12                                 | 56                                      | 94016                         | 2.86             |
|                      | 7                                  | 18112                                   |                               |                  |
|                      | 8                                  | 21632                                   |                               |                  |
|                      | 9                                  | 20992                                   |                               |                  |
|                      | 10                                 | 15424                                   |                               |                  |
|                      | 11                                 | 9920                                    |                               |                  |
|                      | 12                                 | 4832                                    |                               |                  |
|                      | 13                                 | 2176                                    |                               |                  |
|                      | 14                                 | 704                                     |                               |                  |
| 15                   | 192                                |   |                               |                  |
| 16                   | 32                                 |   |                               |                  |
| 18                   | 8                                  | 67248                                   | 54948                         | 2.92             |
|                      | 9                                  | 96192                                   |                               |                  |
|                      | 10                                 | 107712                                  |                               |                  |
|                      | 11                                 | 93312                                   |                               |                  |
|                      | 12                                 | 75096                                   |                               |                  |
|                      | 13                                 | 50112                                   |                               |                  |
|                      | 14                                 | 31104                                   |                               |                  |
|                      | 15                                 | 16416                                   |                               |                  |
|                      | 16                                 | 7848                                    |                               |                  |
|                      | 17                                 | 3168                                    |                               |                  |
|                      | 18                                 | 1080                                    |                               |                  |
|                      | 19                                 | 288                                     |                               |                  |
| 20                   | 72                                 |   |                               |                  |
| 20                   | 9                                  | 249320                                  | 3273040                       | 2.98             |
|                      | 10                                 | 415200                                  |                               |                  |
|                      | 11                                 | 526400                                  |                               |                  |
|                      | 12                                 | 514480                                  |                               |                  |
|                      | 13                                 | 468680                                  |                               |                  |
|                      | 14                                 | 373280                                  |                               |                  |
|                      | 15                                 | 281280                                  |                               |                  |
|                      | 16                                 | 189920                                  |                               |                  |
|                      | 17                                 | 120400                                  |                               |                  |
|                      | 18                                 | 69120                                   |                               |                  |
|                      | 19                                 | 36560                                   |                               |                  |
|                      | 20                                 | 17040                                   |                               |                  |
|                      | 21                                 | 7480                                    |                               |                  |
|                      | 22                                 | 2720                                    |                               |                  |
|                      | 23                                 | 880                                     |                               |                  |
| 24                   | 240                                |   |                               |                  |
| 25                   | 40                                 |   |                               |                  |

Таблиця 1. Розподіл площ та кількості замкнутих діаграм без самоперетинів, утворених із  $n$  кроків.

Ще суттєвішого скорочення об'єму обчислень вдалося досягнути при умові припинення розрахунків на тих гілках дерева, для яких довжина шляху від кореня до гілки перевищує задану довжину, але не утворює циклів. У такий спосіб у рамках розумних часових затрат удалося реалізувати розрахунки, починаючи від найпростіших чотирикратних діаграм до діаграм, утворених двадцятьма кроками.

На наступному етапі роботи програми здійснюємо розрахунок площ одержаних фігур і підраховуємо їхню кількість. Обчислюємо площі діаграми шляхом підрахунку її внутрішніх вузлів, тобто вузлів, що знаходяться всередині утвореної фігури і не належать її межі. Цей процес містить також низку перевірок того, чи вузол справді належить до внутрішніх. Результати розрахунків подано в таблиці 1. У таблиці також наведено відношення повної кількості діаграм, утворених із  $n + 2$  кроків, до кількості діаграм, утворених із  $n$  кроків:  $(N_{n+2})/2N_n$ . Якщо останнє зобразити графічно як функцію кількості кроків, з яких утворена відповідна діаграма (рис. 1), то, як видно із графіка, ця залежність має регулярний характер, що є додатковим підтвердженням правильності розрахунків за вибраним алгоритмом обчислень. Крім того, відношення  $(N_{n+2})/2N_n$  прямує до числа, рів-

ного трьом, що відповідає коефіцієнтові зв'язності квадратної ґратки.

Використовуючи дані таблиці 1, запишемо фрагмент локаторного ряду. При цьому його доданки міститимуть множники  $\exp\left(2\pi i \frac{\Phi}{\Phi_0} S_{\Gamma_n}^i\right)$ , і оскільки для кожної діаграми існує аналогічна, але з протилежним напрямком обходу контуру, то кінцевий результат міститиме лише множники  $\cos\left(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} S_{\Gamma_n}^i\right)$ . Індекс  $i$  позначає  $i$ -ту діаграму площею  $S_{\Gamma_n}$ . Отже,

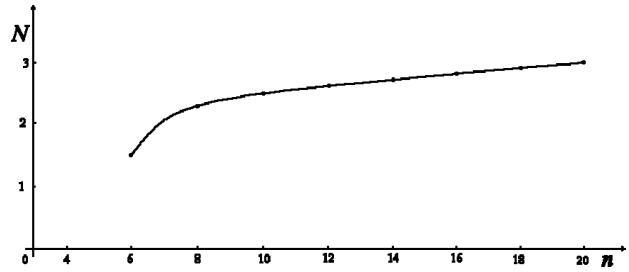


Рис. 1. Залежність відношення  $(n + 2)$ -крокових діаграм до подвійної кількості  $n$ -крокових діаграм від кількості кроків  $n$ .

$$\begin{aligned} \sum (I, E) = & 8x^4 \cos \alpha + 24x^6 \cos 2\alpha + x^8 (96 \cos 3\alpha + 16 \cos 4\alpha) \\ & + x^{10} (360 \cos 4\alpha + 160 \cos 5\alpha + 40 \cos 6\alpha) \\ & + x^{12} (1320 \cos 5\alpha + 960 \cos 6\alpha + 528 \cos 7\alpha + 144 \cos 8\alpha + 24 \cos 8\alpha) \\ & + x^{14} (4728 \cos 6\alpha + 4704 \cos 7\alpha + 3752 \cos 8\alpha + 2016 \cos 9\alpha + 840 \cos 10\alpha + 224 \cos 11\alpha + 56 \cos 12\alpha) \\ & + x^{16} (18112 \cos 7\alpha + 21632 \cos 8\alpha + 20992 \cos 9\alpha + 15424 \cos 10\alpha + 9920 \cos 11\alpha + 4832 \cos 12\alpha \\ & + 2176 \cos 13\alpha + 704 \cos 14\alpha + 192 \cos 15\alpha + 32 \cos 16\alpha) \\ & + x^{18} (67248 \cos 8\alpha + 96192 \cos 9\alpha + 107712 \cos 10\alpha + 93312 \cos 11\alpha + 75096 \cos 12\alpha + 50112 \cos 13\alpha \\ & + 31104 \cos 14\alpha + 16416 \cos 15\alpha + 7848 \cos 16\alpha + 3168 \cos 17\alpha + 1080 \cos 18\alpha + 288 \cos 19\alpha + 72 \cos 20\alpha) \\ & + x^{20} (249320 \cos 9\alpha + 415200 \cos 10\alpha + 526400 \cos 11\alpha + 514480 \cos 12\alpha + 468680 \cos 13\alpha \\ & + 373280 \cos 14\alpha + 281280 \cos 15\alpha + 189920 \cos 16\alpha + 120400 \cos 17\alpha + 69120 \cos 18\alpha + 36560 \cos 19\alpha \\ & + 17040 \cos 20\alpha + 7480 \cos 21\alpha + 2720 \cos 22\alpha + 880 \cos 23\alpha + 240 \cos 24\alpha + 40 \cos 25\alpha), \end{aligned} \tag{17}$$

де  $x = V \exp \langle \ln |g_l| \rangle$ ,  $\alpha = 2 \frac{\phi}{\phi_0}$ ,  $V = V_1 = V_2$ .

У прийнятому наближенні для конфігураційно усереднених локаторів  $\langle \ln |E - \varepsilon_l| \rangle$  одержимо відомий результат

$$\langle \ln |E - \varepsilon_l| \rangle = 1 - \frac{1}{2} \left\{ \left( 1 + \frac{E}{W} \right) \ln |W + E| \right\} \tag{18}$$

$$+ \left(1 - \frac{E}{W}\right) \ln |W - E| \Big\},$$

що дає для дільника ряду

$$\exp \langle \ln |E - \varepsilon_l| \rangle = \frac{|W - E|^{-\frac{1}{2}(1 - \frac{E}{W})}}{|W + E|^{\frac{1}{2}(1 + \frac{E}{W})}} e. \quad (19)$$

Таким чином, ми отримали деяку кількість членів ряду, умови збіжності якого треба встановити. З цією метою зручно використати методику Паде-апроксимації [14], оскільки положення особливостей функції визначається радіусом збіжності її розкладу у степеневий ряд. Перевагою такої апроксимації є те, що вона має як нулі, так і полюси (нулі знаменника), тобто радіус збіжності ряду визначається нулями полінома знаменника апроксиманти. З практичного погляду зручно використовувати послідовність так званих діагональних і близькодіагональних апроксимацій  $[M/M]$  чи  $[(M + 1)/M]$  і  $[M/(M + 1)]$ , за допомогою яких можна окреслити наявні полюси функції, а також виділити “фіктивні” особливості, зумовлені методом апроксимації. Завдяки випадковій природі фіктивні полюси в таких послідовностях апроксимант мають тенденцію зникати при переході до апроксиманти наступного порядку, тоді як справжні особливості стягуються до полюса аналізованої функції.

Для  $\sum (\mathbf{1}, E)$  побудовано послідовності  $[L/M]$  апроксимацій Паде при постійному  $L$  і різних  $M$ . З їх аналізу знайдено істинні полюси масового оператора й оцінено радіус збіжності локаторного ряду, дані про який як функцію магнетного потоку через елементарну комірку наведені в таблиці 2.

| $\Phi/\Phi_0$ | $x_0$ |
|---------------|-------|
| 0             | 0.159 |
| 0.01          | 0.169 |
| 0.05          | 0.179 |
| 1/8           | 0.220 |
| 1/6           | 0.281 |
| 1/5           | 0.319 |
| 1/4           | 0.320 |

Таблиця 2. Радіус збіжності  $x_0$  ряду (17) при різних значеннях магнетного потоку через елементарну комірку.

Ці дані використано для побудови діаграми  $W(E)$  при різних значеннях магнетного потоку. На рис. 2 подано фазові діаграми локалізації за відсутності

поля і при наявності магнетного поля, яке відповідає значенням магнетного потоку через елементарну комірку  $\Phi/\Phi_0 = 0.05, 1/8, 1/6, 1/4$ . Лінії описують границю краю рухливості електронів, так що всередині відповідної кривої стани делокалізовані, а поза нею — локалізовані. Зі зростанням магнетного потоку через елементарну комірку ґратки критичне значення безладу, необхідного для локалізації станів, знижується як у центрі зони, так і по всій її ширині. Крім того, якщо за відсутності поля в границі  $W \rightarrow 0$  край рухливості зливається з границею зони, то з прикладанням поля зона звужується, причому тим сильніше, чим більше зростає величина магнетного потоку через елементарну комірку, так що  $E_c(W, 1/4) \leq E_c(W, 1/6) \leq E_c(W, 1/8) \leq E_c(W, 0)$ . Так, при  $\Phi/\Phi_0 = 0$  границя зони відповідає енергії  $E_0 = 6.3$ , при  $\Phi/\Phi_0 = 1/20 - E_0 = 5.6$ , при  $\Phi/\Phi_0 = 1/8 - E_0 = 4.5$ , при  $\Phi/\Phi_0 = 1/6 - E_0 = 3.6$ , а  $\Phi/\Phi_0 = 1/4 - E_0 = 3.1$ . Оскільки залежність  $E_c(W, \Phi/\Phi_0)$  є періодичною функцією, то  $E_c(W, 1/4)$  відповідає мінімальній ширині зони.

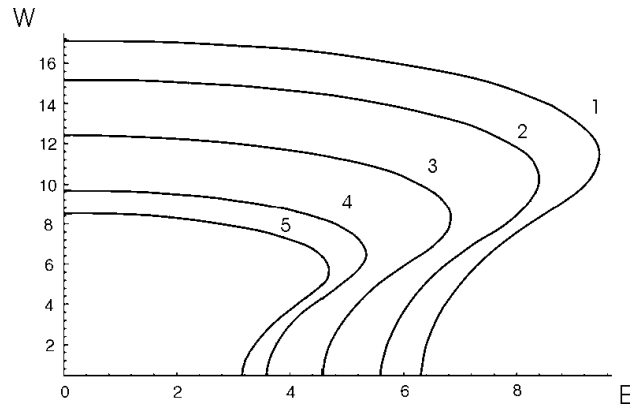


Рис. 2. Фазова діаграма локалізації електронів у магнетному полі при різних значеннях магнетного потоку через елементарну комірку 1 —  $\Phi/\Phi_0 = 0$ , 2 —  $\Phi/\Phi_0 = 0.05$ , 3 —  $\Phi/\Phi_0 = 0.125$ , 4 —  $\Phi/\Phi_0 = 1/6$ , 5 —  $\Phi/\Phi_0 = 0.25$ .

Аналіз фазової діаграми показує, що слабке постійне магнетне поле є фактором, який підсилює локалізаційні властивості електронних систем як у центрі зони, так і на її краях. Причому вплив магнетного поля на локалізацію підсилюється зі зростанням його величини. А позаяк залежність від магнетного поля є періодичною функцією, то найбільші зсуви краю рухливості до центра зони і найменше значення критичного безладу в центрі зони спостерігаємо при значенні магнетного потоку через елементарну комірку, який дорівнює  $\Phi/\Phi_0 = 0.25$ .

Зазначимо, що результати, які ми одержали, при якісно правильному описі процесів локалізації є оцінкою зверху для ділянки делокалізованих станів, що приводить до завищених значень ширини зони й величини критичного безладу на границі рухливості. Ми також не виявили зростання критичного значення

$W$  безладу в центрі зони, необхідного для локалізації збуджень у магнетному полі, яке було отримане в [3,4] чисельними методами з використанням мето-

дики трансфер-матриці.

Автор висловлює подяку Ткачукові В. М. за постійну увагу до роботи й обговорення її результатів.

- 
- [1] A. Furusaki, Phys. Rev. Lett. **82**, 604 (1999).  
 [2] H. Potempa, L. Schweitzer, preprint cond-mat-9908122 (1999).  
 [3] B. Mieck, H. A. Weidenmüller, Z. Phys. B **84**, 59 (1991).  
 [4] T. Dröse, M. Batsch, I. Kh. Zharekeshev, B. Kramer, Phys. Rev. B **57**, 37 (1998).  
 [5] Q. Li, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, G. S. Grest, Phys. Rev. B **40**, 2825 (1989).  
 [6] U. Fastenrath, J. Phys. C **2**, 7123 (1990).  
 [7] М. В. Садовский, Журн. эксп. теор. физ. **80**, 1135 (1981).  
 [8] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).  
 [9] Дж. Займан, *Модели беспорядка* (Мир, Москва, 1982).  
 [10] О. М. Возняк, Журн. фіз. досл. **2**, 357 (1998).  
 [11] E. N. Economou, M. H. Cohen, Phys. Rev. B **5**, 2931 (1972).  
 [12] V. Srivastava, J. Phys. C **1**, 4311 (1989).  
 [13] В. Липский, *Комбинаторика для программистов* (Мир, Москва, 1988).  
 [14] Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис, *Аппроксимации Паде* (Мир, Москва, 1986).

## MAGNETIC FIELD INFLUENCE ON THE LOCALIZATION OF ELECTRONIC EXCITATION FOR TIGHT-BINDING MODEL WITH A DIAGONAL DISORDER

O. M. Voznjak

*The Precarpathian Vasyl Stefanyk University, Chair of Solid State Physics,  
57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, UA-76025, Ukraine*

The closed self-avoiding paths on the square lattice in a homogeneous magnetic field for the electrons with a diagonal disorder for 4-, 6-, 8-, 10-, 12-, 14-, 16-, 18 and 20 steps have been constructed using computer methods. The total number of diagrams with the fixed perimeter length and their squares have been calculated. The locator series for mass operator has been built on the basis of these data. The conditions of its convergency have been explored using the Pade-approximation method. The localization phase diagrams for several values of the magnetic flux through unit cell have been constructed. It has been shown that the magnetic field leads to a decrease in the delocalization states both as regard critical energy and disorder strength.