Der Metall-Isolator Übergang in ungeordneten Systemen

Dieter Vollhardt

Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, Werner-Heisenberg-Institut für Physik, 8000 München 40

Inhalt

I. **Nicht-wechselwirkende, Quantenmechanische Teilchen in Ungeordneten Systemen**
Theoretische Beschreibung der Unordnung
Der „Schwach" Lokalisierte Bereich
Diffusion klassischer und quantenmechanischer Teilchen
Systematische Berechnung der Leitfähigkeitskorrektur
Der Magnetfeldeinfluß auf die Lokalisierung
Der Anderson-Übergang
Skalentheorie
Die Methode der Selbstkonsistenz

II. **Wechselwirkende, Quantenmechanische Teilchen in Ungeordneten Systemen**
Anschätzung der Korrekturen
Der Metall-Isolator Übergang
Experimente und Vermutungen

Ein Metall-Isolator Übergang trennt zwei physikalische Bereiche, die sich bzgl. ihrer elektrischen Gleichstrom-Leitfähigkeit $\sigma(\omega=0)$ charakteristisch unterscheiden: während ein Metall eine endliche Gleichstrom-Leitfähigkeit ($\sigma(0)>0$) besitzt, ist ein Isolator durch $\sigma(0)=0$ ausgezeichnet. Ein solcher Übergang ist kein Privileg ungeordneter Systeme. Er kann auch in ganz sauberen, rein kristallinen Materialien auftreten, in denen es eine Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt, die für den elektrischen Strom verantwortlich sind. In einem solchen System kann die Überlappung von Energiebändern zu einem Metall-Isolator Übergang führen. Ein anderer Mechanismus für einen solchen Übergang liegt z.B. in der Strukturveränderung von Kristallen, bei der es zu einer neuen Gitterperiodizität kommt. Es gibt tatsächlich ganz unterschiedliche physikalische Gründe für das Auftreten eines Metall-Isolator-Übergangs[1]. Wir werden uns hier auf den Metall-Isolator Übergang in **ungeordneten** Systemen beschränken, d.h. wo „Unordnung" ursächlich für den Übergang verantwortlich ist. (Mit „Unordnung" soll dabei die Störung einer strikten Gitterperiodizität z.B. durch Verunreinigungen, Störstellen oder Defekte gemeint sein). Unser Verständnis der Physik ungeordneter Systeme, ihrer Transporteigenschaften und des dort beobachteten Metall-Isolator Übergangs hat sich in den letzten 5-6 Jahren sehr geändert und sich dabei wesentlich vertieft[2,3].

Wir wollen uns im ersten Teil des Vortrags mit dem Verhalten **nicht-wechselwirkender**, quantenmechanischer Teilchen in einer ungeordneten Umgebung befassen. Im zweiten Teil dagegen werden auch die Effekte einer Wechselwirkung der Teilchen untereinander berücksichtigt.

I. Nicht-Wechselwirkende, Quantenmechanische Teilchen in Ungeordneten Systemen

Von dreidimensionalen Systemen (d.h. solchen mit $d=3$ Raumdimension) wissen wir, daß es bei Temperatur $T=0$ weder Gitterschwingungen (Phononen) noch irgendwelche inelastischen Prozesse gibt. Tatsächlich gibt es in einem unbegrenzten, perfekten Gitter (Abb. 1a) keinerlei Streuung. Dies ist eine Konsequenz der Quantenmechanik.

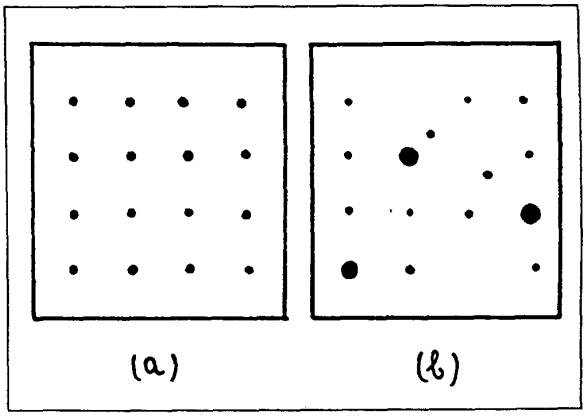

Abb. 1
(a) Regelmäßiges, (b) durch Defekte und Verunreinigungen gestörtes Gitter

Folglich hat ein solches System eine unendlich gute Leitfähigkeit σ. Man kann auch sagen, daß die charakteristische Stoßzeit τ der Teilchen durch Streuung an Defekten usw. unendlich groß ist ($\tau=\infty$). Sind die Teilchen Fermionen (und auf solche beschränken wir uns hier), so folgt daraus, daß die mittlere freie Weglänge $l=v_F\tau$ der Teilchen ebenfalls unendlich lang ist ($l=\infty$), wobei v_F die Fermi-Geschwindigkeit ist. Die Wellenfunktion eines Teilchens zeichnet sich in diesem Fall durch eine strikte räumliche Phasenkohärenz aus. – In einem durch Verunreinigungen oder Defekten **schwach** gestörten Gitter (Abb. 1b) ist dies anders: die Streuung der Teilchen an diesem Defekten bedingt eine endliche Stoßzeit τ und deshalb eine endliche mittlere freie Weglänge l. Die Gleichstromfähigkeit ist deshalb ebenfalls endlich und ergibt sich zu

$$\sigma(0) \equiv \sigma_0 = \frac{e^2 n}{m}\tau \qquad (1)$$

wobei e die Ladung der Teilchen (Elektronen), n ihre Dichte und m ihre Masse ist. Man bezeichnet σ_0 auch als „Boltzmann-Leitfähigkeit", da (1) ein direktes Resultat der Boltzmann'schen Transporttheorie ist. Die Streuung der Teilchen führt zur **Diffusion** (Abb. 2), d.h. zu einer diffusiven Bewegung. Die Phasenkohärenz der Wellenfunktionen wird da-

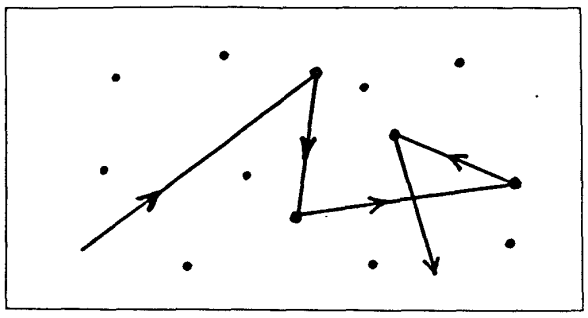

Abb. 2
Diffusion eines Teilchens in einem ungeordneten System

durch beschränkt; trotzdem ist die Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ eines Teilchens immer noch **ausgedehnt**, d.h. es gilt

$$\lim_{r \to \infty} |\psi(\vec{r})|^2 \neq 0 \qquad (2)$$

Wird nun die Unordnung verstärkt (z.B. durch Erhöhung der Verunreinigungskonzentration) so kann es unter Umständen zu einer **„Lokalisierung"** einer Wellenfunktion kommen, so daß

$$\lim_{r \to \infty} |\psi(\vec{r})|^2 \propto e^{-r/\xi} \qquad (3)$$

gilt, wobei ξ die sogenannte Lokalisierungslänge ist. Eine Quantifizierung dieser vagen Aussage ist zunächst schwierig. Wir wollen deshalb zunächst einen ein-dimensionalen Fall (d = 1) betrachten[1].

Als Modell betrachten wir dafür ein verallgemeinertes Kronig-Penney-Modell, nämlich eine Kette von δ-Funktions-Po-

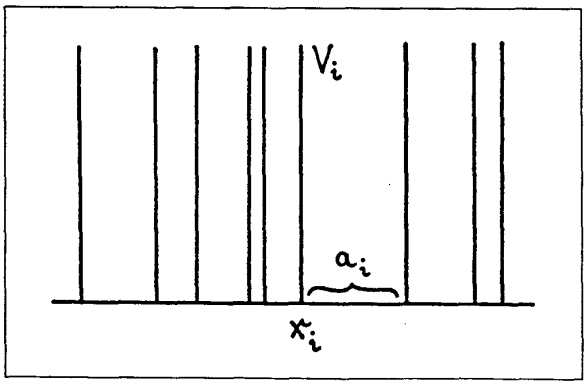

Abb. 3
Eindimensionales Modell für ein ungeordnetes System

tentialen (Abb. 3) an den Orten x_i mit Potentialstärken V_i und Abständen a_i. Das Potential V(x) ist dann durch

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i V_i\, \delta(x-x_i) \qquad (4)$$

gegeben und die Schrödinger-Gleichung lautet

$$[-\vec{\nabla}^2 + \sum_i V_i\, \delta(x-x_i) - k^2]\, \psi(x) = 0 \qquad (5)$$

wobei $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ der Impuls ist. Wir betrachten nun eine einzelne δ-Funktion am Ursprung (x = 0). Die Wellenfunktion $\psi_+(x)$ für $x \gtrless 0$ sind dann gegeben durch

$$\begin{aligned} \psi_-(x) &= A_- e^{ikx} + B_- e^{-ikx} \\ \psi_+(x) &= A_+ e^{ikx} + B_+ e^{-ikx} \end{aligned} \qquad (6)$$

Die Anschluß-Bedingung bei x = 0 für die Wellenfunktion bzw. ihre räumliche Ableitung lauten $\psi_+(0) = \psi_-(0)$ und $\psi_+'(0) = \psi_-'(0) + V_0\, \psi(0)$. Wir suchen nun nach einer Periodizität in ψ in der Weise, daß $|\psi_+(a)|^2 = |\psi_-(0)|^2$ für einen beliebigen Wert x = a gilt. Anders ausgedrückt: wir suchen nach der Eigenschaft $\psi_+(a) = e^{i\tilde{k}a}\, \psi_-(0)$ für zunächst beliebige a und $\tilde{k}$. Dies führt zu der Bedingung

$$\cos \tilde{k}a - \cos ka = (V_0/k) \sin ka \qquad (7)$$

woraus sich $\tilde{k}$ und a als Funktion von k ergeben. Für eine **Kette** von Potentialen läßt sich daraus schließen, daß eine Wellenfunktion nur dann periodisch sein wird (und der Zustand demnach ausgedehnt), wenn alle Abstände a_i zwischen den Potentialen gleich sind ($a_i \equiv a$) und auch alle Potentiale V_i denselben Wert haben ($V_i \equiv V$). Anderenfalls fallen alle physikalisch sinnvollen Wellenfunktionen exponentiell ab, stellen also lokalisierte Zustände dar. Das bedeutet, daß es selbst bei einer beliebig geringen statistischen Streuung der Werte von a_i und V_i nur lokalisierte Lösungen der Schröndinger Gleichung gibt.

Die erste quantitative Definition von „Lokalisierung" geht auf Anderson[4], 1958, zurück. Er untersuchte ein drei-dimensionales Modell, nämlich ein regelmäßiges Punktgitter, auf dessen Gitterplätzen i sich jeweils ein Atom im Energiezustand V_i befindet (Abb. 4). Es wird nun ein quantenmechanisches Teilchen (z.B. ein Elektron) betrachtet, das (i) von einem Gitterplatz zum nächst benachbarten hüpfen kann (kinetische Energie) und (ii) dort auf dem i-ten Gitter-

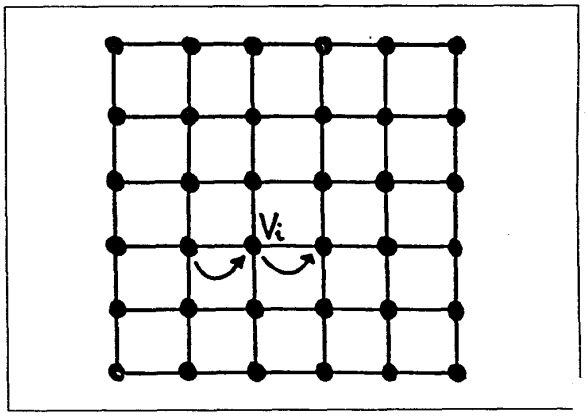

Abb. 4
Unordnungsmodell von Anderson

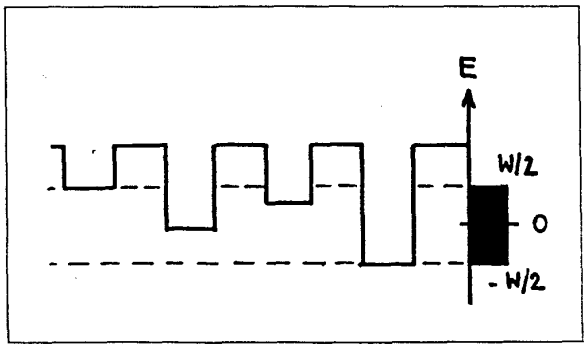

Abb. 5
Beispiel für die Energieverteilung einiger Atome

platz das Potential V_i spürt (potentielle Energie). Die Frage ist nun, wie das Teilchen durch diese Potentiale beeinflußt wird. – In dem Grenzfall, daß alle V_i gleich sind ($V_i \equiv V$) erhält man natürlich ein scharf begrenztes Energie-Band, dessen Breite durch die Energie B gegeben ist. Diese Situation ändert sich aber, wenn die V_i statistisch verteilt wurden (Abb. 5), z.B. mit einer Rechteck-Verteilung

$$P(V_i) = \begin{cases} 1/W \text{ für } & |V_i| \leq \frac{W}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \qquad (8)$$

Es läßt sich jetzt, für ein unbegrenztes System, die Frage stellen: Wie groß ist die Rückkehrwahrscheinlichkeit P eines Teilchens zu einem bestimmten Gitterplatz im Grenzfall langer Zeiten ($t \to \infty$)? Im Fall $P = 0$ ist das Teilchen im System „verschwunden", es wird also durch einen ausgedehnten Zustand charakterisiert. Im Fall $P > 0$, also endlicher Rückkehrwahrscheinlichkeit, spricht man dagegen von „Lokalisierung", d.h. das Teilchen wird durch einen lokalisierten Zustand beschrieben.

Die Antwort auf die Frage hängt von dem Verhältnis der maximalen Energieunterschiede der Atome W zur ungestörten Bandbreite B, d.h. von W/B ab. Diese Zahl (!) ist ein Maß für die Stärke der Energie-Fluktuationen in dem System, d.h. ein Maß für die Unordnung. Quantitativ ausgedrückt lautet die Antwort, daß man $P = 0$ für $W/B \lesssim 5$ findet während $P > 0$ für $W/B \gtrsim 5$ vorliegt[4]. Dazwischen liegt ein scharfer Übergang, der „Anderson-Übergang". Anderson fand also, daß unterhalb einer bestimmten kritischen Unordnung $(W/B)_c \simeq 5$ ausgedehnte Zustände vorliegen, während oberhalb dieses Werts die Zustände lokalisiert sind. Anders ausgedrückt: hat das Teilchen eine Energie E, die unterhalb einer kritischen, durch die Unordnung bestimmte, Energie E_c liegt ($E < E_c$), so ist es lokalisiert (Isolator), während für $E > E_c$ die Energie-Fluktuationen des Systems für das Teilchen nicht mehr so dominierend sind und ein ausgedehnter Zustand vorliegt (Metall). Da Elektronen in einem Metall die charakteristische Energie E_F (Fermi-Energie) besitzen, läßt sich der Anderson-Übergang durch Veränderung von E_F herbeiführen.

Wie sieht dieser Übergang nun eigentlich aus? Nach Mott[5] sollte er **diskontinuierlich** verlaufen. Diese Vermutung basierte auf den folgenden Argumenten. Die Gleichstromleitfähigkeit σ_0 (Gl. 1) eines d-dimensionalen Systems läßt sich mit Hilfe von $l = v_F\tau$, $v_F = \hbar k_F/m$ und der Dichte eines Fermi-Gases, $n = a^{-d}$ (wobei die Fermi-Wellenzahl k_F und der mittlere Teilchenabstand a durch $k_F \simeq \pi/a$ verknüft sind), schreiben als

$$\sigma_0 \simeq \left(\frac{e^2}{h}\frac{a^{2-d}}{\pi}\right)\frac{l}{a} = \sigma_c\frac{l}{a} \qquad (9)$$

Die Leitfähigkeit σ_c ist eine im wesentlichen universelle Größe, die jedenfalls kaum von dem Grad der Unordnung des Systems abhängt – diese Abhängigkeit ist hauptsächlich in der mittleren freien Weglänge l, d.h. im Verhältnis l/a in (9), enthalten. Wird die Unordnung vergrößert, z.B. durch Erhöhung der Verunreinigungskonzentration, verkleinert sich l und damit die Leitfähigkeit. Damit die aus der Boltzmann'schen Transporttheorie gewonnene Gl.(1) bzw. (9) aber überhaupt gültig ist, muß l immer größer als der mittlere Teilchenabstand a sein (Ioffe-Regel Kriterium); kleinere l machen keinen Sinn. Mott postulierte deshalb eine „minimale metallische Leitfähigkeit" σ_{min}, die im wesentlichen durch σ_c gegeben ist (genauer gesagt, $\sigma_{min} \simeq c\,\sigma_c$, wobei $c \simeq 0.08$-0.3 eine systemabhängige Konstante ist, die durch eine Reduktion der Zustandsdichte der Elektronen an der Fermi-Kante gegenüber dem Fermi-**Gas** gegeben ist).

Er argumentierte, daß die Leitfähigkeit σ_0 bei Annäherung an den Metall-Isolator-Übergang von der metallischen Seite her proportional zu l absinken und dann, bei $l \simeq a$, von dem Wert σ_{min} abrupt auf Null fallen würde (Abb. 6). Es sei aber bereits jetzt vorweggenommen, daß dieses Konzept trotz scheinbar langjähriger experimenteller Bestätigung nicht zutrifft. Tieftemperatur-Experimente haben gerade in den letzten 3-4 Jahren die Existenz einer minimalen metallischen Leitfähigkeit falsifiziert[6]. Wir werden später noch darauf zurückkommen.

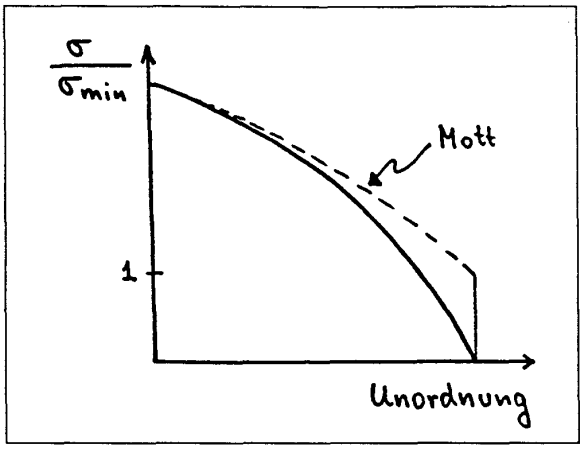

Abb. 6
Mögliche Abhängigkeiten der Leitfähigkeit von der Unordnungskonzentration

Theoretische Beschreibung der Unordnung

In dem eben besprochenen, von Anderson ursprünglich betrachteten Modell, bewegt sich ein Teilchen auf einem regelmäßigen Gitter, auf dem die Energie der Gitterpunkte statistisch verteilt ist (Abb. 7a). Die „Unordnung" besteht hier also ausschließlich in den **Energie**-Zuständen der Gitterplätze. Ein alternatives Modell geht auf Edwards[7] zurück. In diesem Modell wird ein Teilchen konstanter Energie an statistisch verteilten Streuzentren gleichen Potentials elastisch gestreut (Abb. 7b). Die Unordnung besteht hier-

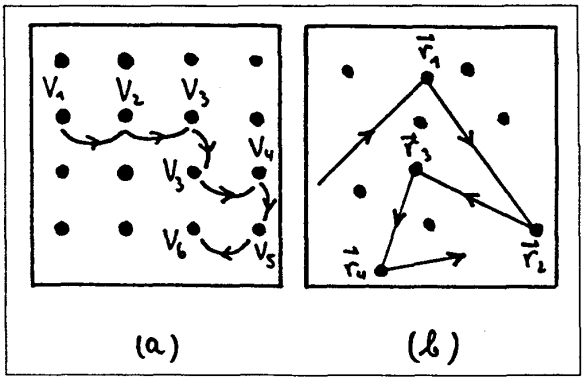

Abb. 7
Unordnung und Bewegung eines Teilchens im Modell von (a) Anderson, (b) Edwards

bei also in der **Ortsverteilung** der Streuzentren. Während des erstere Modell von dem lokalisierten Bereich ausgeht, findet das Edwards-Modell seinen Ausgangspunkt im Bereich ausgedehnter Zustände (schwache Streuung). Es eignet sich besonders für die Formulierung einer systemati-

schen Störungstheorie, die vom ungestörten metallischen Bereich ausgeht und dann schwache Verunreinigungen, d.h. eine geringe Unordnung, berücksichtigen will. Die folgenden Untersuchungen basieren deshalb auf dem Edwards-Modell. Wir betrachten dabei (i) nicht-wechselwirkende Teilchen, die (ii) an punktförmigen, statistisch verteilten Streuzentren gleichen Potentials gestreut werden. Uns interessiert dabei die Frage nach der Leitfähigkeit σ, bzw. dem Diffusionskoeffizienten D, eines solchen ungeordneten Systems. Die beiden Größen sind übrigens durch die Einstein-Relation

$$\sigma = e^2 N_F D \tag{10}$$

verknüft; N_F ist dabei die Zustandsdichte an der Fermi-Kante.

Als Maß der Unordnung soll uns im folgenden ein dimensionaler Parameter λ dienen. Es gilt $\lambda \propto n_i V_o^2$, d.h. λ ist im wesentlichen durch die Verunreinigungskonzentration n_i und die Streustärke V_o^2 der Streuzentren gegeben. Man nennt λ oft auch „Kopplungskonstante".

Im Fall $d=1$ sahen wird, daß selbst beliebig schwache Unordnung ($\lambda \to 0$) zu Lokalisierung führt. Der „kritische" Wert der Unordnung, λ_c, oberhalb dessen Lokalisierung vorliegt, ist also durch $\lambda_c = 0$ gegeben. Im Fall $d=3$ dagegen ist λ_c von Null verschieden ($\lambda_c > o$). Für $\lambda < \lambda_c$ liegt ein Leiterverhalten (Metall) vor, das sich durch eine endliche Gleichstromleitfähigkeit σ_o, bzw. einen endlichen Diffusionskoeffizienten D_o, ausdrückt. Für $\lambda > \lambda_c$ hat man es mit einem Isolatorverhalten zu tun. Hier gilt $\sigma_o = 0$; dafür hat ein Isolator aber eine endliche Polarisierbarkeit, bzw. Dielektrizitätskonstante ε. Bei $\lambda = \lambda_c$ liegt der Anderson-Übergang.

Offensichtlich kommt dem Fall $d=2$ (d.h. dünnen Filmen) eine Grenzstellung zu. Es stellt sich nämlich die Frage, ob auch hier $\lambda_c = 0$ gilt d.h. ob auch hier, wie im Fall $d=1$, selbst bei beliebig schwacher Unordnung alle Zustände lokalisiert sind. Oder gilt $\lambda_c > 0$, so daß es einen Anderson-Übergang bei einer endlichen Verunreinigungskonzentration gibt? Mit anderen Worten, die fast trivial anmutende Frage lautet: „Gibt es metallische Leitfähigkeit in $d=2$ bei $T=0$?". Oder gibt es z.B. eine minimale metallische Leitfähigkeit? Diese überaus einfachen Fragen waren viele Jahre lang ungeklärt. Ihre Beantwortung hat zu unvermutet tiefliegenden und prinzipiellen Einsichten in die Physik ungeordneter Systeme und ihrer Transporteigenschaften geführt.

Der „Schwach" Lokalisierte Bereich

Wir wollen zunächst den Fall sehr schwacher Unordnung ($\lambda \ll 1$) betrachten. Der Ausgangspunkt ist also der **metallische** Bereich und seine Beeinflussung durch eine geringe Verunreinigungskonzentration. Wir sind demnach weit von dem Anderson-Übergang entfernt, so daß sich diese Effekte mit Hilfe einer Störungstheorie in dem Unordnungs-Parameter λ berechnen lassen. Schwache Unordnung bedeutet, daß die mittlere freie Weglänge l viel größer ist als der mittlere Teilchenabstand $a \sim k_F^{-1}$, d.h. $k_F l \gg 1$ bzw. $E_F \tau \gg 1$, wobei E_F die Fermienergie und τ die charakteristische Stoßzeit ist. Wir wählen deshalb

$$\lambda = \frac{1}{2\pi E_F \tau} \tag{11}$$

im folgenden als unseren **kleinen** Störungsparameter ($\lambda \ll 1$). Ausgehend vom metallischen Bereich wollen wir durch eine Störungstheorie die Vorboten der Lokalisierung, d.h. Korrekturen zur metallischen Leitfähigkeit σ_o, betrachten

$$\sigma = \sigma_o + \delta\sigma, \; |\delta\sigma| \ll \sigma_o \tag{12}$$

Diese zu untersuchenden störungstheoretischen Effekte werden üblicherweise „schwache Lokalisierung" genannt. Ihre experimentellen Konsequenzen wurden in Prof. Bergmanns Vorlesung ausführlich dargestellt. Unser Ziel ist die Berechnung von $\delta\sigma = f(L,\omega,T,H)$ in Abhängigkeit äußerer Parameter wie die Systemlänge L, der Frequenz ω, der Temperatur T oder eines Magnetfelds H.

Diffusion klassischer und quantenmechanischer Teilchen

Die Leitfähigkeit σ_o, Gl. (1),

$$\sigma_o \propto \frac{1}{\lambda}$$

ist ein Resultat der Boltzmann'schen Transporttheorie. In ihr werden aufeinanderfolgende Stöße der Teilchen als unabhängig voneinander angenommen – es besteht keine räumliche oder zeitliche Korrelation zwischen den Stößen. Das bedeutet z.B., daß „Mehrfachstreuung" eines Teilchens an einem Streuzentrum nicht berücksichtigt wird. Wenn es nun aber in einem System eine endliche Wahrscheinlichkeit für das wiederholte Auftreten solcher Mehrfachstreuung gibt, so bricht die oben erwähnte Annahme der Unabhängigkeit von Stoßprozessen zusammen und die Gültigkeit des Ergebnisses für σ_o in Gl.(1) wird mindestens fragwürdig.

Zur Untersuchung dieses zentralen Punktes betrachten wir das Diffusionsverhalten eines Teilchens in einem d-dimensionalen ungeordneten System. Das Teilchen befinde sich zur Zeit $t=0$ am Ort $\vec{r}_o$ (Abb. 8a).

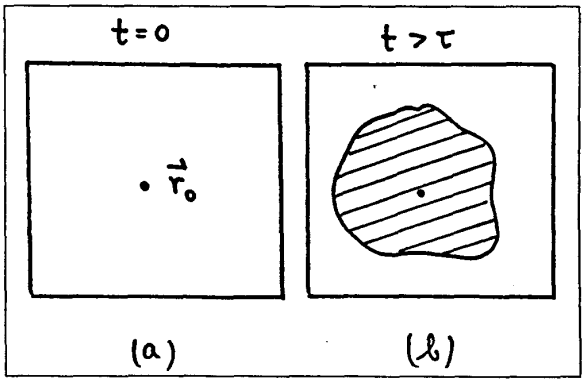

Abb. 8
Wahrscheinlichkeitsverteilung nach Diffusion, (a) $t=0$, (b) $t>\tau$

Aufgrund der Diffusion entfernt sich das Teilchen dann von $\vec{r}_o$. Zu einer späteren Zeit t kann man über seinen Ort nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage machen: es befindet sich dann innerhalb eines (glatten) Volumens (Abb. 8b), dessen Größe durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\vec{r},t)$, nämlich durch die Lösung der Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial P}{\partial t} - D_o \vec{\nabla}^2 P = 0 \tag{13}$$

bestimmt ist. Der Diffusionskoeffizient D_o ist hierbei durch $D_o = v_F^2 \tau / d$ gegeben, wobei v_F die charakteristische Geschwindigkeit der Teilchen ist. Die explizite Lösung von (13) ergibt

$$P(\vec{r},t) = \frac{e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_o|^2}{4D_o t}}}{(4\pi D_o t)^{d/2}} \tag{14}$$

Für Zeiten $t \gg \tau$ spielt die Exponentialfunktion keine Rolle mehr, so daß (aufgeschlüsselt nach der Dimension d) gilt

$$P(\vec{r},t) \propto \frac{1}{V_{diff}} = \begin{cases} \frac{1}{(D_0 t)^{1/2}} & d=1 \\ \frac{1}{D t} & d=2 \\ \frac{1}{(D_0 t)^{3/2}} & d=3 \end{cases} \qquad (15)$$

Wir beobachten, daß $V_{diff} \equiv (D_0 t)^{d/2}$ gerade das d-dimensionale Volumen beschreibt, in das ein Teilchen nach der Zeit t hineindiffundiert ist.

Diese Betrachtung ist rein klassisch. Um die Unterschiede im diffusiven Verhalten klassischer und quantenmechanischer Teilchen (Elektronen) zu verstehen, betrachten wir nun den Weg eines Teilchens bei der Diffusion von einem Punkt A zu einem Punkt B (Abb. 9)[8].

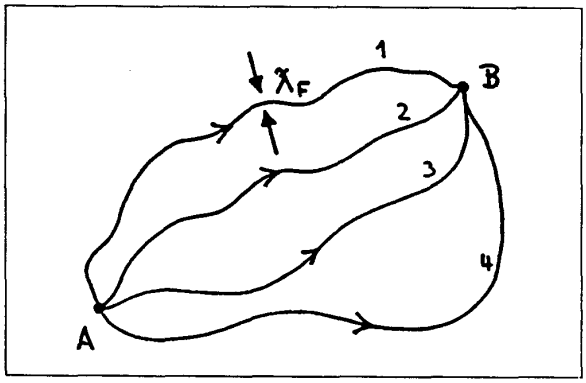

Abb. 9
Mögliche Wege eines Teilchens von A nach B

Dieser Transport kann auf verschiedenen Trajektorien geschehen (in Abb. 9 sind vier Beispiele angegeben). Diese Trajektorien oder „Röhren" haben eine typische Breite, die durch die Fermi-Wellenlänge λ_F

$$\lambda_F = \frac{\hbar}{v_F m} \qquad (16)$$

bestimmt ist. Im klassischen Fall ($\hbar = 0$) sind diese Wege beliebig scharf, im quantenmechanischen Fall dagegen gilt $\lambda_F \simeq k_F^{-1} \simeq a$, die Röhren haben also tatsächlich einen endlichen Durchmesser. Wir nehmen an, daß (i) die Unordnung λ in dem System sehr klein sei ($\lambda_F/l \propto \lambda \ll 1$) und (ii) die Temperatur so niedrig sei, daß inelastische Stöße, charakterisiert durch die Stoßzeit τ_{in}, nur selten vorkommen, d.h. $\tau_{in} \gg \tau$.

Da der Transport von A nach B entlang der Trajektorien i geschieht, ist mit jedem Weg i eine Wahrscheinlichkeits-Amplitude A_i verknüft. Wann wir die Gesamt-Wahrscheinlichkeit, den Punkt B von A aus zu erreichen, mit W bezeichnen, so ist W durch den Betragsquadrat der Summe der Amplituden gegeben:

$$W = \left| \sum_i A_i \right|^2 \qquad (17a)$$

$$= \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^* \qquad (17b)$$

Der erste Term in (17b) beschreibt separate, d.h. nicht interferierende Wege (also den rein klassischen Fall, in dem die Röhren beliebig scharf sind), während der zweite Term gerade diese Interferenz von Weg-Amplituden darstellt, also den typisch quantenmechanischen Beitrag. In der Boltzmann-Theorie werden diese Interferenzterme vernachlässigt. In den meisten Fällen ist das auch gerechtfertigt: da die Trajektorien verschieden lang sind, haben die Weg-Amplituden A_i unterschiedliche Phasenbeziehungen, was (im Mittel) zu **destruktiver** Interferenz führt. Die Interferenzen spielen also im allgemeinen gar keine Rolle. Dazu gibt es allerdings eine bestimmte Ausnahme, nämlich wenn die Punkte A und B **zusammenfallen** (Abb. 10)! Ausgangspunkt und Endpunkt sind dann identisch und der Weg dazwischen kann immer in zwei entgegengesetzten Richtungen durchlaufen werden, vorwärts und rückwärts. Die eben betrachtete Wahrscheinlichkeit W, von A nach B zu gelangen ist dann gerade die **Rückkehr**-Wahrscheinlichkeit zum Ausgangspunkt. Da die Wege 1 und 2 in Abb. 10 gleich sind, haben die Weg-Amplituden A_1, A_2 **kohärente** Phasen. Es kommt deshalb zu konstruktiver Interferenz, der quantenmechanische Beitrag zu W wird also sehr wichtig sein. Dazu brauchen wir nur Gl. (17 b) zu betrachten. Für $A_1 = A_2 \equiv A$ erhält man für die klassische Rückkehrwahrscheinlichkeit (Vernachlässigung der Interferenzterme) $W_{klass} = 2|A|^2$, während der quantenmechanische Fall $W_{QM} = 2|A|^2 + 2A_1A_2^* = 4|A|^2$ ergibt. Man findet also

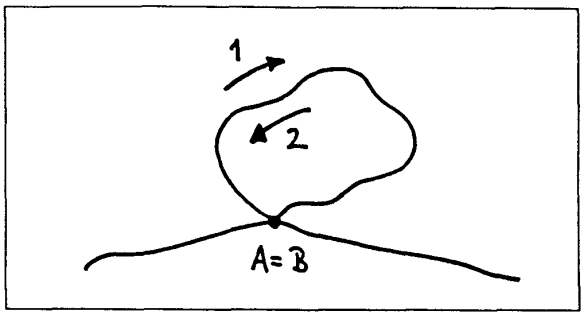

Abb. 10
Rückkehr eines Teilchens zum Ausgangspunkt

$$W_{QM} = 2\, W_{klass} \qquad (18)$$

Die quantenmechanische Rückkehrwahrscheinlichkeit ist demnach doppelt so groß wie die klassische. Man kann deshalb sagen, „Quantendiffusion" sei langsamer als klassische Diffusion, da es dort zu einer stärkeren Rückstreuung zum Ausgangspunkt kommt. Mit anderen Worten: Quantenmechanische Teilchen sind in einer ungeordnete Umgebung bei sehr tiefen Temperaturen weniger beweglich als klassische. Sie führen deshalb auch zu einer entsprechend geringeren Leitfähigkeit.

Wir wollen diesen Effekt auf σ abschätzen. Dazu soll die Änderung $\delta\sigma$ relativ zur metallischen Leitfähigkeit σ_0, d.h. $\delta\sigma/\sigma_0$, betrachten werden. Wegen der zu erwartenden Absenkung der Leitfähigkeit wird das Vorzeichen von $\delta\sigma/\sigma_0$ negativ sein. Außerdem wird diese Änderung proportional zur Wahrscheinlichkeit sein, daß während der Diffusion ein geschlossener Weg wie in Abb. 10 überhaupt zustandekommt. Es ist dies die Wahrscheinlichkeit, daß sich ein Teilchen in einer geschlossenen Röhre befinden, d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß sich so eine Trajektorie während der Diffusion selbst schneidet. Wir betrachten deshalb eine d-dimensionale Röhren (Abb. 11) mit Durchmesser λ_F, d.h. einem Querschnitt $\simeq \lambda_F^{d-1}$. Während der Zeit dt bewegt sich ein Teilchen über die Entfernung $dl = v_F dt$, so daß das ent-

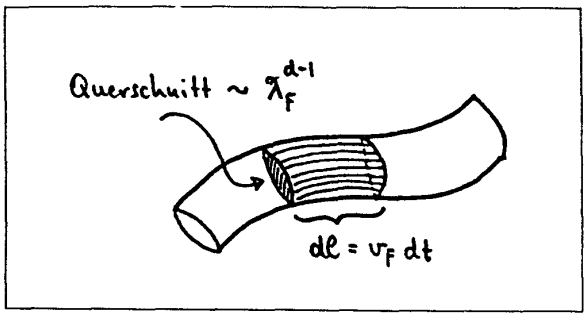

Abb. 11
Ausschnitt aus einer quantenmechanischen Trajektorie

sprechende Volumenelement der Röhre durch $dV = v_F dt\, \lambda_F^{d-1}$ gegeben ist. Das von dem Teilchen durch Diffusion insgesamt erreichbare Volumen ist aber durch $V_{diff} = (D_o t)^{d/2}$ (Gl. 15) gegeben. Die oben beschriebene Wahrscheinlichkeit W, daß sich ein Teilchen in einer geschlossenen Röhre befindet ist deshalb durch das Verhältnis der beiden Volumina gegeben. Wir erhalten

$$W = \int_{\tau}^{\tau_{in}} \frac{dV}{V_{diff}} = v_F \lambda_F^{d-1} \int_{\tau}^{\tau_{in}} \frac{dt}{(D_o t)^{d/2}} \qquad (19)$$

wobei wir über alle Zeiten $\tau \leq t \leq \tau_{in}$ integrieren: τ ist die mikroskopische Stoßzeit für einen elastischen Einzelprozess (kürzere Zeiten sind nicht sinnvoll), während τ_{in} die kürzeste inelastische Relaxationszeit im System ist. Sie bestimmt die maximale Zeit, während der es zu einer kohärenten Interferenz der Amplituden kommen kann. Wegen $D_o \propto \tau \propto 1/\lambda$ und $\lambda_F \propto \hbar$ erhält man dann

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_o} \propto -\lambda \begin{cases} (\tau_{in}/\tau)^{1/2}, & d=1 \\ \hbar \ln(\tau_{in}/\tau), & d=2 \\ \hbar^2 (\tau_{in}/\tau)^{-1/2}, & d=3 \end{cases} \qquad (20)$$

Wenn wir annehmen, daß die inelastische Relaxationsrate für $T \to 0$ mit irgendeinen Potenzverhalten der Temperatur verschwindet, d.h. wie $1/\tau_{in} \propto T^p$, wobei p eine Konstante ist, so erhält man für (20)

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_o} \propto -\lambda \begin{cases} T^{-p/2} & d=1 \\ \hbar (p/2) \ln \frac{\hbar/\tau}{k_B T} & d=2 \\ \hbar^2 T^{p/2} & d=3 \end{cases} \qquad (21)$$

Wir beobachten das Folgende: (i) $\delta\sigma$ ist negativ, d.h. die Leitfähigkeit nimmt ab für sinkende Temperaturen, (ii) die oben angeführten Argumente haben eine relative Korrektur $\delta\sigma/\sigma_o$ ergeben, die linear im Unordnungsparameter $\lambda \ll 1$ ist (niedrigste Ordnung in λ), (iii) außer im strikt ein-dimensionalen Fall ist diese Korrektur quantenmechanischen Ursprungs, d.h. für $\hbar \to 0$ verschwindet sie. (Im Fall $d=1$ hat die „Röhre" in Abb. 11 wie im klassischen Fall keinen endlichen Durchmesser; da es nur Vorwärts- und Rückwärtsstreuung gibt, sind alle Wege dann sowieso „geschlossen").

Man erhält in $d=2$ also eine **logarithmische** Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeitskorrektur $\delta\sigma$. Ganz allgemein führt die elastische Unordnungsstreuung in Dimensionen $d \leq 2$ zu einem im Prinzip divergenten Temperaturverhalten von $\delta\sigma$. Damit die ursprüngliche Annahme $|\delta\sigma| \ll \sigma_o$ gültig bleibt, dürfen die Ergebnisse in (21) für $d \leq 2$ deshalb nicht bei **zu** tiefen Temperaturen angewandt werden; aus (21) lassen sich also z.B. keine Schlüsse auf das Verhalten von $\delta\sigma$ bei exakt $T=0$ ziehen!

Abschließend soll darauf hingewiesen werden, daß die Ergebnisse von (21) unter einer stillschweigenden Annahme abgeleitet werden, nämlich daß die Weg-Amplituden 1 und 2 in Abb. 9 tatsächlich kohärent zueinander sind ($A_1 = A_2$).

Es wurde also angenommen, daß Teilchenzustände mit Impuls $\vec{k}$ und $-\vec{k}$ äquivalent sind und deshalb miteinander interferieren können. Eine solche „Zeitumkehr-Invarianz" ist dann gegeben, wenn kein äußeres Magnetfeld vorliegt und die Verunreinigungen nicht-magnetisch sind. Im anderen Fall entsteht eine neue Situation, die wir später behandeln werden.

Es soll auch noch einmal betont werden, daß die Ergebnisse in (20), (21) auf der Berücksichtigung von Rückstreueffekten (Mehrfachstreuung) beruhen, d.h. der Korrelation aufeinanderfolgender Stöße, und sich deshalb im Rahmen der Boltzmann'schen Transporttheorie nicht erhalten lassen. Auch die CPA ("coherent potential approximation"), einem in Unordnungsproblem geradezu klassischen Näherungsverfahren, ist dazu nicht in der Lage, da sie ähnliche Annahmen wie die Boltzmann-Theorie macht ("single-site approximation").

Systematische Berechnung der Leitfähigkeitskorrektur

Die Argumente, die zu den Ergebnissen in (21) geführt haben, enthalten bereits die wesentliche Physik. Sie ermöglichen ein Verständnis der Temperaturabhängigkeiten von $\delta\sigma$, aber zu mehr als Proportionalitäts-Beziehungen können sie nicht führen. So bleiben z.B. die exakten Vorfaktoren in (20) unbestimmt. Außerdem läßt sich auf diese Weise die Störungstheorie nicht erweitern. Wir benötigen daher eine systematische Berechnungsmethode, die sich allerdings auch nur innerhalb eines gewissen mathematischen Rahmens formulieren läßt, auf den hier nicht eingegangen werden kann. Um zu einer genaueren Berechnung von $\delta\sigma$ zu kommen, werden wir deshalb Methoden „benutzen" ohne ihren theoretischen Hintergrund wirklich erörtern zu können. Es werden nur Konzepte und Begriffe vorgestellt, bzw. an die Plausibilität appelliert, um diese Begriffe zumindest einmal erwähnt zu haben. Für wirkliche Rechnungen sind sie nämlich unentbehrlich.

Trotz aller quantenmechanischen Effekte beruhen die Ergebnisse in (20) auf dem diffusiven Verhalten der Teilchen. Ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\vec{r},t)$, (14), wird durch die Diffusionsgleichung (13) bestimmt. Eine Fourier-Transformation von (13) bzw. von $P(\vec{r},t)$ führt zu $P(\vec{p},\omega)$. Wie man leicht aus (13) (mit entsprechenden Randbedingungen) erkennt, gilt

$$P(\vec{q},\omega) \propto \frac{1}{-i\omega + D_o q^2} \qquad (22)$$

Man nennt dies einen „Diffusionspol", da $P(\vec{q},\omega)$ für $\vec{q},\omega \to 0$ divergiert. Sein Urspung liegt ausschießlich in der Teilchenzahlerhaltung während der Diffusion.

Die Kenntnis von $P(\vec{r},t)$ (einer lokalen Größe, die eine Dichteverteilung beschreibt), d.h. von $P(\vec{q},\omega)$, reicht allerdings nicht aus wenn man dynamische Größen wie die Leitfähigkeit $\sigma(\vec{q},\omega)$ oder den Diffusionskoeffizienten $D(\vec{q},\omega)$ berechnen will. Dafür benötigt man z.B. die sog. „Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion" $\chi(\vec{r},t)$, die die Abhängigkeit einer Dichteverteilung an einem Orts- und Zeitpunkt von der an

einem anderen Orts- und Zeitpunkt beschreibt. Ihre Fouriertransformierte, $\chi(\vec{q},\omega)$, hat die allgemeine Gestalt[9]

$$\chi(\vec{q},\omega) = \frac{D(\vec{q},\omega)q^2}{-i\omega + D(\vec{q},\omega)q^2}\,\chi(\vec{q},0) \qquad (23)$$

hat also ebenfalls einen Diffusionspol, wobei $D(q,\omega)$ ein $\vec{q},\omega$-abhängiger Diffusions**koeffizient** ist. Wenn wir $\chi(\vec{q},\omega)$ kennen ist uns natürlich auch sofort $D(\vec{q},\omega)$ bekannt. Diese Größe ist also von zentraler Bedeutung bei der systematischen Berechnung von Korrekturen $\delta\sigma$, δD zu σ_o, $D_o$durch die Unordnungsstreuung. Sie läßt sich im Rahmen einer Störungstheorie mit Hilfe einer diagrammatischen „Zeichensprache" (Feynman Diagramme) formulieren[10]. Dabei werden die mikroskopischen Streuprozesse durch eine graphische Beschreibung berücksichtigt: (i) die Bewegung der Teilchen wird durch eine Linie mit Pfeil ("Propagator") charakterisiert, während (ii) die Streuung an einer Verunreinigung (durch ein Kreuz angedeutet), durch eine gestrichelte Linie symbolisiert wird. Ein Beispiel ist in Abb. 12 dargestellt, Der nach rechts laufende, obere Pfeil steht für ein „Teilchen" (mit Energie E größer als der Fermienergie E_F), der nach links laufende, untere Pfeil für ein „Loch" ($E < E_F$). Auf diese Weise wird die Dichte-Dichte Korrelation eines Teilchen-Loch-Paars durch die übliche Diffusion (nämlich einer Abfolge unabhängiger Stöße) mit Hilfe recht anschaulicher Diagramme beschrieben. Es sollte betont werden, daß die gestrichelte Linie eine Korrelation von Teilchen und Loch bedeutet und **keine** Wechselwirkung, die ja hier noch gar nicht berücksichtigt wird. Die Pfeile sind mit

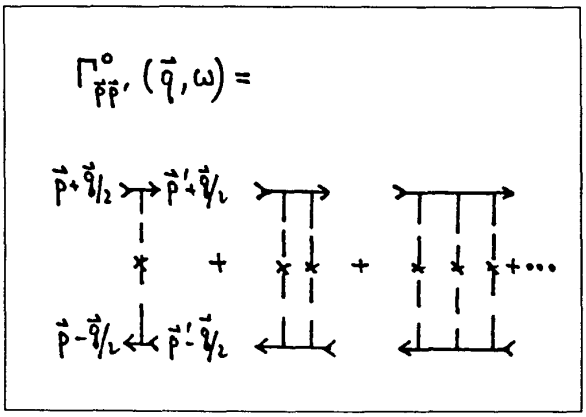

Abb. 12
Leiterdiagramme beschreiben Diffusion

Anfangs- und End-Impulsen für Teilchen und Löcher gekennzeichnet. Die Diagramme in Abb.12 lassen sich leicht aufsummieren und man erhält

$$\Gamma^o_{\vec{p}\vec{p}'}(\vec{q},\omega) = \frac{U_o\,\tau}{-i\omega + D_o\,q^2} \qquad (24)$$

wobei U_o die Energie eines Streuzentrums ist. Es handelt sich also, wie erwartet, gerade um den eben diskutierten Diffusionspol. Hierbeit sind ω und $\vec{q}$ der Energie- bzw. Impulsunterschied zwischen Teilchen ($E+\omega$, $\vec{p}+\vec{q}/2$) und Loch ($E,\vec{p}-\vec{q}/2$). Ein solches Teilchen-Loch-Paar mit $\omega \ll E$ und $|\vec{q}| \ll |\vec{p}|$ läßt sich im Impulsraum wie in Abb. 13 darstellen: da es ein Paar ist, laufen Teilchen und Loch immer in dieselbe Richtung, machen dieselben Stöße und sind also für alle Zeiten korreliert. Hier wirkt die Teilchenzahl-Erhaltung und hier liegt der Grund warum der Diffusionspol (24) immer existiert – selbst bei inelastischer Streuung.

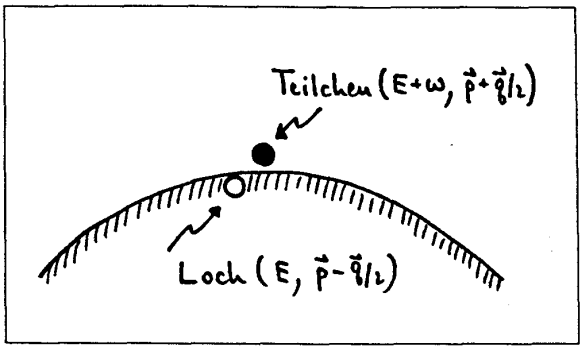

Abb. 13
Teilchen-Loch Anregung an der Fermioberfläche

Im Falle der bereits angesprochenen Zeitumkehr-Invarianz (damit ist nicht eine **globale** Invarianz für das gesamte System gemeint, sondern jene von Ein-Teilchen Zuständen) sind Teilchen-Zustände mit $\vec{k}$ und $-\vec{k}$ äquivalent. Das bedeutet, daß wir den Impuls eines (Propagator-) Pfeils „umdrehen" dürfen ($\vec{k} \to -\vec{k}$). Wir wollen das an der Teilchen-Loch-Leiter in Abb. 11 verdeutlichen: Wir drehen alle unteren Pfeile um und lassen dabei auch den Impuls in sein Negatives übergehen ($\vec{p}-\vec{q}/2 \to -\vec{p}+\vec{q}/2$ etc). Auf diese Weise (Abb. 14) erhalten wir ebenfalls eine diagrammatische Lei-

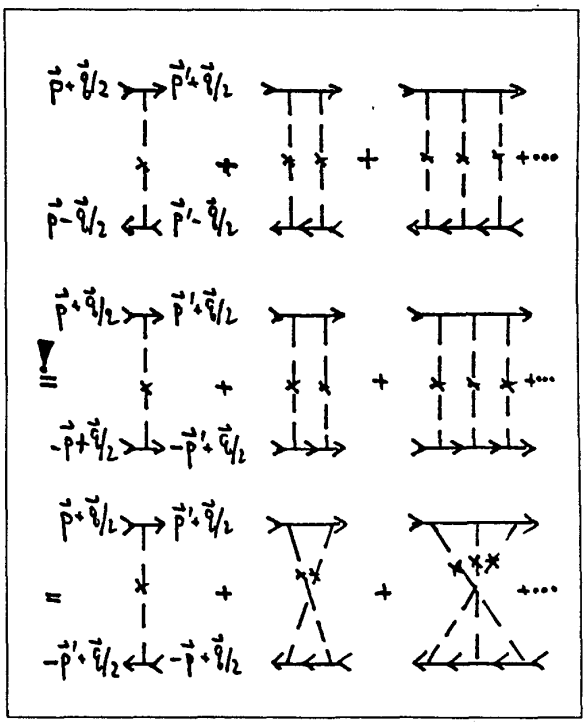

Abb. 14
Benutzung der Zeitumkehr-Invarianz zur Berechnung „maximal überkreuzter" Diagramme

ter aber diesmal mit beiden Pfeilen in derselben Richtung ("Teilchen-Teilchen-Leiter"). Um die übliche Teilchen-Loch Darstellung zu erhalten, brauchen wir nun nur noch den gesamten unteren Teil der Diagramme räumlich herumzudrehen und bekommen dann merkwürdige, scheinbar komplizierte, „maximal überkreuzte", d.h. fächerartige Diagramme[11]. Ihren Beitrag[12] erhalten wir sehr leicht, wenn wir beachten, daß sie aus einer Teilchen-Loch-Leiter (24) entstan-

den sind, in der der Impulsübertrag aber durch $(\vec{p}+\vec{q}/2) - (-\vec{p}'+\vec{q}/2) = \vec{p}+\vec{p}'$ statt durch $\vec{q}$ gegeben ist[13]. Ihre Summe $\Lambda^{o}_{pp'}(\vec{q},\omega)$ ergibt sich also zu[12]

$$\Lambda^{o}_{\vec{p}\vec{p}'}(\vec{q},\omega) = \frac{U_0 \tau}{-i\omega + D_0 (\vec{p}+\vec{p}')^2} \qquad (25)$$

Der wesentliche Unterschied zum Teilchen-Loch-Diffusionspol (24) ist, daß der Diffusionspol in (25) nicht auf der Teilchenzahl-Erhaltung beruht. Das bedeutet, daß z.B. inelastische Prozesse, in denen Teilchen ja aus ihrem Energiezustand herausgestreut werden, die Polstruktur in (25) zerstören ("abschneiden"). Diese Eigenschaft werden wir später noch benutzen.

Der Beitrag zur Leitfähigkeit ist durch die „Kubo-Formel"[10], d.h. das Integral über (25) gegeben; genauer gesagt, durch

$$\delta\sigma \propto \int d\vec{p} \int d\vec{p}' \frac{(\vec{p}\cdot p')}{-i\omega + D_0(\vec{p}+\vec{p}')^2} \qquad (26)$$

Der Hauptbeitrag des Integranden kommt aus dem Bereich $\vec{p}+\vec{p}' \simeq 0$, d.h. $\vec{p}' \simeq -p$ und das bedeutet gerade Rückwärtsstreuung! Der hier betrachtete Beitrag ist tatsächlich identisch mit dem früher diskutierten, bei dem wir die Rückkehrwahrscheinlichkeit eines Teilchens zu seinem Ausgangspunkt berechnet hatten. Es ist klar, daß eine betonte Rückwärtsstreuung die Lokalisierung fördern wird.

Da alle Prozesse an der Fermikante stattfinden ($|\vec{p}| = p_F$), bedeutet Rückwärtsstreuung, daß man es mit einer Impuls**änderung** von $2k_F$ zu tun hat. Man spricht deshalb auch von „$2k_F$-Streuung". Hier liegt eine prinzipielle Ähnlichkeit mit der Cooper-Paarung in Supraleitern vor. Auch dort koppeln Teilchen mit Impulsen $\vec{k}$ und $-\vec{k}$, d.h. es kommt zu einer Teilchenkorrelation quer durch die Fermikugel. Aus diesem Grund bezeichnet man den Teilchen-Teilchen Diffusionspol in (25) oft auch als „Copper-Pol" bzw. „Copperon", während der Teilchen-Loch Diffusionspol in (24) „Diffuson" heißt.

Unter Berücksichtigung aller Vorfaktoren und durch Substitution $\vec{p}+\vec{p}' = \vec{k}$ erhält man aus (26) eine frequenzabhängige Leitfähigkeitskorrektur[14]

$$\frac{\delta\sigma(\omega)}{\sigma_0} = -\frac{k_F^{2-d}}{\pi m} \int_0^{1/\ell} dk \frac{k^{d-1}}{-i\omega + D_0 k^2} \qquad (27)$$

wobei das negative Vorzeichen, das ja gerade die Minderung der Leitfähigkeit beschreibt, durch das Minuszeichen in $\vec{p}' = -\vec{p}+\vec{k}$ gegeben ist, also durch die Rückwärtsstreuung. In $d=2$ ergibt sich dann

$$\delta\sigma(\omega) = -\frac{1}{2\pi^2}\frac{e^2}{\hbar} \ln \frac{1}{\omega\tau} \qquad (28)$$

Für $\omega \to 0$ nimmt die Leitfähigkeit also tatsächlich ab. Gl.(27), (28), gelten für ein unbegrenztes System bei $T=0$. Im Fall eines endlichen Systems (z.B. eines d-dimensionalen Hyperkubus mit Seitenlänge L) muß dagegen die Integration in (27) an der unteren Grenze bei Impulsen $k \simeq 1/L$ abgeschnitten werden, da es kleinere Impulse nicht gibt. Dafür darf man dann aber die Frequenz gegen Null gehen lassen[12]. Man erhält dann eine längenabhängige Leitfähigkeitskorrektur für $T = 0$:

$$\delta\sigma(L) = -\left(\frac{e^2}{\hbar}\right) c_d \frac{\ell^{2-d}}{d-2} \left[1-\left(\frac{L}{\ell}\right)^{2-d}\right] \qquad (29a)$$

wobei $c_d = (2/\pi)S_d/(2\pi)^d$ und S_d die Oberfläche der d-dimenionalen Kugel ist. Speziell in $d = 2$ gilt

$$\delta\sigma(L) = -\frac{1}{\pi^2}\left(\frac{e^2}{\hbar}\right) \ln\left(\frac{L}{l}\right) \qquad (29b)$$

Man beachte, daß der Forfaktor der logarithmischen Abhängigkeit in (28), (29a) durch eine universelle Konstante gegeben ist wobei $(e^2/\hbar)^{-1} \simeq 4k\Omega$ ein universeller Widerstand ist. Daß (28), (29) tatsächlich eine störungstheoretische Korrektur zu σ_0 in niedrigster Ordnung von λ darstellt, erkennt man aus $\sigma = \sigma_0 + \delta\sigma$, d.h. (29a) ergibt

$$\sigma \simeq \sigma_0 \left\{1-\lambda (k_F \ell)^{2-d} \frac{d}{d-2}\left[1-\left(\frac{L}{\ell}\right)^{2-d}\right]\right\} \qquad (30a)$$

bzw. in $d=2$

$$\sigma \simeq \sigma_0 \left\{1-2\lambda \ln\left(\frac{L}{l}\right)\right\} \qquad (30b)$$

d.h. die Korrektur $\delta\sigma/\sigma_0$ ist linear in $\lambda \ll 1$ und hat ein negatives Vorzeichen. Die Leitfähigkeit nimmt also bei Vergrößerung des Systems ab; dies ist ein Vorbote der Lokalisation.

Wie lassen sich diese Ergebnisse experimentell nachprüfen? Dazu beachten wird, daß Experimente immer bei endlichen Temperaturen durchgeführt werden. Neben der elastischen Unordnungsstreuung hat man es also auch immer mit **inelastischen** Prozesse zu tun, die durch eine inelastische Streuzeit τ_{in} beschrieben werden (wir nehmen wieder an, daß $\tau_{in}^{-1} \propto T^p$). Auf diese Weise wird eine neue Energieskala τ_{in}^{-1} eingeführt, d.h. die Energie $-i\omega$ in (27) wird durch $-i\omega + 1/\tau_{in}$ ersetzt. Auf diese Weise wird der Teilchen-Teilchen Diffusionspol abgeschnitten (d.h. $\omega \to 0$ führt zu keiner Divergenz mehr) und die Frequenzabhängigkeit in (28), $\ln(1/\omega\tau)$, wird durch $\ln(\tau_{in}/\tau) \propto \ln(\hbar/k_B T\tau)$, also durch eine Temperaturabhängigkeit wie in (20), (21) ersetzt. Alternativ kann man auch sagen, daß durch die inelastischen Prozesse eine neue Längenskala $L_{in} = (D_0 \tau_{in})^{1/2}$, die sog. „Thouless-Länge", eingeführt wird. Es ist eine mittlere inelastische Diffusionslänge, auf deren Skala ein Teilchen einen inelastischen Prozess erleidet und damit aus seinem Energiezustand gestreut wird. Für $L_{in} < L$ spielt die Systemgröße L also gar keine Rolle mehr: ein Teilchen „sieht" nur L_{in} als relevante Länge. Deshalb wird die Länge L in (29), (30) durch L_{in} ersetzt. Das führt dann ebenfalls zu genau derselben Temperaturabhängigkeit wie in (20), (21).

Eine Erniedrigung der Leitfähigkeit ($\delta\sigma < 0$) bedeutet eine Erhöhung des Widerstandes ($\delta R > 0$) für abnehmende Temperaturen. Die logarithmische Temperaturabhängigkeit des Widerstandes sehr dünner Filme ($d=2$), wie z.B. in Abb. 15 ist mittlerweilse in zahlreichen Experimenten gemessen worden (vgl. Prof. Bergmann's Vorlesung und Ref. 16).

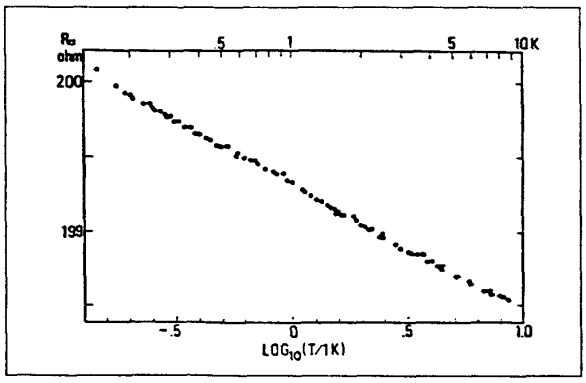

Abb. 15
Logarithmische Temperaturänderung des Widerstands dünner AuPd-Filme [15]

In der vorangegangenen Diskussion haben wir uns auf die sog. „normale" Streuung, d.h. Streuung an nicht-magnetischen Verunreinigungen beschränkt. Deshalb spielte der Spin bisher keine Rolle. Im Fall, daß die Verunreinigungen ein magnetisches Moment tragen, kommt es dagegen zu einer Spin-Streuung der Teilchen, die einen „Spin-Flip" verursachen kann. Die Teilchen sehen dann so etwas wie ein räumlich und zeitlich fluktuierendes Magnetfeld. Die Zeitumkehr-Invarianz wird dadurch aufgehoben, so daß das Cooperon (25) nicht mehr divergiert (der Pol wird durch einen konstanten Term $1/\tau_s$ abgeschnitten[17]; τ_s ist hierbei eine charakteristische Stoßzeit für Spinstreuung). Feldtheoretische Untersuchungen[18,19] die wir trotz ihrer fundamentalen Bedeutung hier nicht besprechen können[20], ergeben, daß es trotzdem auch in diesem Fall in $d=2$ zu einer logarithmischen Korrektur wie in (30b) kommt, allerdings mit einem Vorfaktor λ^2 statt nur mit λ; die Korrektur ist also noch wesentlich kleiner als im Fall normaler Streuung. Da Cooperonen keinen divergenten Beitrag mehr liefern, können diese logarithmischen Beiträge nur durch die einfachen Diffusonen (24) entstehen, d.h. durch die üblichen Diffusionsprozesse. Es ist bis jetzt noch nicht gelungen, dieses Ergebnis mit Hilfe einfacher Wahrscheinlichkeitsargumente zu verstehen, wie es bei der normalen Streuung möglich war.

Bei Verunreinigungen mit hoher Kernladungszahl kommt es zu einer Spin-Bahn-Streuung der Teilchen. Feldtheoretische Untersuchungen haben auch in diesem Fall für $d=2$ eine logarithmische Korrektur der Art wie in (30 b), also in linearer Ordnung von λ, vorhergesagt[19,21]; allerdings hat diese Korrektur ein **positives** Vorzeichen[17]. Die Leitfähigkeit wächst also an! Eine anschauliche Begründung dafür und die volle experimentelle Bestätigung wurde in der vorhergehenden Vorlesung von Prof. Bergmann diskutiert.

Der Magnetfeldeinfluß auf die Lokalisierung

Die im Falle normaler Verunreinigungsstreuung besprochenen Lokalisierungseffekte beruhen auf der Interferenzfähigkeit, d.h. der Quantenkohärenz, der zeitumgekehrten Wege 1 und 2 in Abb. 10. Sie hängen deshalb empfindlich von jeglicher Störung der Zeitumkehr-Invarianz von Impulszuständen $\vec{k}$ und $-\vec{k}$ ab. Eine solche Störung wird im vorliegenden Fall z.B. durch ein Magnetfeld bewirkt. In seiner Gegenwart wird ein Zustand nicht mehr allein durch den Impuls $\vec{k}$ sondern durch den elektromagnetischen Impuls $\vec{k}-2e\vec{A}$ charakterisiert. Dabei ist $\vec{A}$ das Vektorpotential und der Faktor 2e (statt einfach e) beruht auf der Korrelation **zweier** Teilchen ganz wie in der Supraleitung. Wenn wir jetzt $\vec{k}$ in $-\vec{k}$ übergehen lassen, sind die Impulszustände, d.h. die Wege 1 und 2 in Abb. 10, natürlich nicht mehr äquivalent. Die Phasenkohärenz wird durch das Magnetfeld also gestört, die Interferenzfähigkeit dadurch gemindert und die Lokalisierung in ihrer Wirkung abgeschwächt. Mathematisch gesprochen beruht das darauf, daß die Amplituden A_1 und A_2 nicht mehr gleich sind, sondern magnetfeldabhängige Phasenfaktoren erhalten[8]

$$A_1 \to A \exp\left[\frac{ie}{hc}\int d\vec{l}\cdot\vec{A}\right]$$

$$= A \exp\left[ieHS/c\right] \qquad (31)$$

$$A_2 = A_1^*$$

Sie sind durch das Linienintegral über das Vektorpotential $\vec{A}$ gegeben, d.h. durch den magnetischen Fluß $H \cdot S$, wobei H das Magnetfeld und S die Fläche des geschlossenen Pfades in Abb. 10 ist (c = Lichtgeschwindigkeit). Da sich die Teilchen diffusiv verhalten, ist die Fläche durch $S \simeq D_0 t$ gegeben. Die Rückkehrwahrscheinlichkeit W_H eines Teilchens zu seinem Ausgangspunkt in einem endlichen Magnetfeld ist wieder durch (17) gegeben. Man erhält also

$$W_H = 2\,|A|^2\,[1 + \cos(2eHDt/c)] \qquad (32)$$

Für $H=0$ finden wir das alte Resultat $W_{H=0} = 4\,|A|^2$.

Da die interferenzbedingte Leitfähigkeitskorrektur im Magnetfeld, $\delta\sigma(H)$, wie auch vorher durch die Rückkehrwahrscheinlichkeit W_H bestimmt ist, wird die Gesamtänderung der Leitfähigkeit durch das Magnetfeld, $\Delta\sigma(H) = \delta\sigma(H) - \delta\sigma(0)$, entsprechend durch die Wahrscheinlichkeitsdifferenz $\Delta W = W_H - W_{H=0}$ festgelegt:

$$\Delta\sigma(H) = -\int_{\tau}^{\tau_{in}} v_F\,\lambda_F^{d-1}\,\frac{dt}{(D_0 t)^{d/2}}\left[\cos\,(2eHD_0 t/c) - 1\right] \qquad (33)$$

In $d=2$ läßt sich das Ergebnis als $\Delta\sigma(H) = e^2 F(x)$ schreiben, wobei $x = 2eD_0 H\tau_{in}/c$. Die Funktion F(x) hat die Grenzwerte

$$F(x) \simeq \begin{cases} x^2 & \text{für } x \ll 1 \\ \ln x & \text{für } x \gg 1 \end{cases} \qquad (34)$$

In schwachen Magnetfeldern ($x \ll 1$) ergibt sich deshalb

$$\Delta\sigma(H) \propto H^2\,\tau_{in}^2 \qquad (35)$$

während in stärkeren Feldern ($x \gg 1$) eine logarithmische Feldabhängigkeit

$$\Delta\sigma(H) \propto \ln(H\tau_{in}) \qquad (36)$$

vorliegt. In jedem Fall ist $\Delta\sigma$ **positiv** ($\Delta R < 0$), der Widerstand nimmt mit wachsendem Magnetfeld ab ("anomaler Magnetowiderstand")[19]. Der Grund dafür liegt in der Störung der Phasenkohärenz durch das Magnetfeld, die zu einer Schwächung der Lokalisierung führt. Das „kritische" Feld, H_c, das durch $x \simeq 1$ bestimmt wird, und bei dem der Umschlag von dem H^2 zu dem ln H Verhalten erfolgt, hängt wegen τ_{in} von der Temperatur ab und ist (bei den experimentell überlicherweise benutzten Temperaturen) von der Größenordnung $H_c \simeq$ 100-500 Gauß (≙ 10-50 mT). Es handelt sich also um sehr geringe Felder wenn man bedenkt, daß man im **klassischen** Fall $\Delta\sigma(H)/\sigma_0 \simeq -(\omega_L\tau)^2$ erhält, (wobei ω_L die Larmorfrequenz ist) also eine um viele Größenordnungen kleinere Korrektur, die außerdem noch negativ ist. Magnetfelder haben damit einen ganz empfindlichen Einfluß auf die Lokalisierung.

Der Anderson-Übergang

Wir haben uns bis jetzt damit begnügt, Korrekturen zur metallischen Leitfähigkeit σ_0, die durch die elastische Streuung an Verunreinigungen hervorgerufen werden, zu berechnen. Diese Korrekturen sind die Resultate einer Störungstheorie und gehen linear in der kleinen Größe $\lambda \ll 1$. Wir haben aber auch gefunden, daß für $d \leq 2$ die ω, L oder T-Abhängigkeit der Korrekturen, trotz der Kleinheit von λ, für $\omega \to 0$, oder $L \to \infty$ oder $T \to 0$ zu deren Divergenz führt. Dann bricht die Störungstheorie zusammen, d.h. sie wird sinnlos, da die Voraussetzung $|\delta\sigma| \ll \sigma_0$ nicht mehr erfüllt ist. Was dann? Man könnte versuchen, Korrekturen höherer Ordnung in λ zu berechnen, aber das führt nicht weit und ist auch zu kompliziert. Außerdem ist ein Phasenübergang und das dort auftretende „Kritische Verhalten" sowieso nur in unendlicher Ordnung Störungstheorie zu erhalten. Da eine exakte Lösung des Problems a priori nicht möglich scheint, muß man auf andere Methoden zurückgreifen, von denen zwei angesprochen werden sollen: (i) eine Skalentheorie, die sich auf Renormierungs-Methoden stützt und $\sigma(L)$ bestimmt und (ii) eine selbstkonsistente Theorie, in der $\sigma(\omega)$ berechnet wird.

Skalentheorie

Eine überaus erfolgreiche Skalentheorie wurde 1979 von Abrahams et al.[12] eingeführt. Es handelt sich dabei um eine Ein-Parameter Skalentheorie für den sog. Leitwert g eines d-dimensionalen Systems (eines „Hyper-Kubus" mit Seitenlänge L) in Verbindung mit der von diesen Autoren ebenfalls zuerst formulierten Störungstheorie, in der die bereits ausführlich diskutierte Längenabhängigkeit der Leitfähigkeitskorrektur $\delta\sigma(L)$ berechnet wurde.

Der Leitwert (oder das „Leitvermögen") g eines d-dimensionalen Kubus mit Seitenlänge L ist gegeben durch

$$g = \left(\frac{e^2}{h}\right)^{-1} \frac{1}{R} = \left(\frac{e^2}{h}\right)^{-1} \sigma L^{d-2} \qquad (37)$$

wobei R der Widerstand und σ die Leitfähigkeit ist. Der Leitwert ist eine **Zahl**, d.h. ein dimensionsloser Parameter, dessen theoretische Relevanz, besonders was die Längenabhängigkeit angeht, schon vorher in richtungsweisenden Arbeiten von Thouless[22] erkannt und diskutiert worden war.

Im metallischen Bereich (Ohm'scher Bereich) ist die Leitfähigkeit σ per Definition längenunabhängig, so daß der Leitwert dort die Abhängigkeit $g \propto L^{d-2}$ hat. Im Isolator dagegen fallen die Wellenfunktionen exponentiell ab, so daß man auch eine exponentielle Längenabhängigkeit von σ (und daher auch von g) erwarten kann: $g \propto \sigma \propto \exp(-L/\xi)$, wobei ξ eine unbekannte „Lokalisierungslänge" darstellt. Zu klären bleibt, wie sich g mit der Systemgröße L im Bereich **zwischen** diesen beiden Extremfällen verändert. Um diese Frage zu beantworten, fügen wir Hyperkuben der Seitenlänge L zu einem größeren Kubus der Seitenlänge bL zusammen. Wie hängt nun g(bL), der Leitwert des größeren Systems, von g(L), dem des ursprünglichen Systems, ab? Im Prinzip könnte g(bL) eine Funktion von g(L), b und L sowie von allen möglichen nichtuniversellen Materialeigenschaften (τ, k_F, m...) sein. Die wesentliche Annahme von Abrahams et al[12] ist nun, das das **alte** g der einzig wichtige Parameter des Systems ist, der das **neue** g bestimmt, d.h.

$$g(bL) = f[b, g(L)] \qquad (38a)$$

bzw.

$$g(L) = f[b, g(L/b)] \qquad (38b)$$

d.h. mikroskopische Details werden als unwichtig angenommen. Gl. (38b) wird auch als „Renormierungsgruppen-Gleichung" bezeichnet. Da diese Beziehung für alle Werte von b gelten soll, d.h. unabhängig von b sein soll, differenzieren wir (38 b) nach b und setzen dann b = 1. Auf diese Weise erhält man

$$\frac{dg}{d \ln L} = \tilde{f}[g(L)] \qquad (39)$$

Die logarithmische Längenableitung von g(L) soll also selbst nur eine Funktion von g(L) sein. (Durch die logarithmische Ableitung in (39) erreicht man, daß Längen**skalen** von L (z.B. l oder ξ in L/l, l/ξ), die wir ja gar nicht kennen, herausfallen). Abrahams et al. definierten nun eine sog. „β-Funktion"

$$\beta \equiv \frac{1}{g}\frac{dg}{d \ln L} = \frac{d \ln g}{d \ln L} = F[g(L)] \qquad (40)$$

die im wesentlichen durch (39) gegeben ist und deshalb ebenfalls nur eine Funktion von g(L) ist. Ihr Verhalten bei Änderung von g(L) bestimmt das Leitfähigkeitsverhalten des untersuchten Systems.

Aufbauend auf dem was wir bereits wissen, lassen sich Grenzfälle von β leicht berechnen. Im lokalisierten Bereich ($g \ll 1$) findet man wegen $g \propto \exp(-L/\xi)$

$$\beta \simeq \ln g \qquad (41)$$

Im metallischen Bereich dagegen ($g \gg 1$) gilt $\sigma = \sigma_0 + \delta\sigma$, wobei $\delta\sigma$ durch (29a) gegeben ist. Aus (37) und (40) erhält man deshalb

$$\beta = d\text{-}2 - \frac{C_d}{g} + 0\left(\frac{1}{g^2}\right) \qquad (42)$$

Der erste Summand, (d-2), stellt das Ohm'sche Gesetz dar (rein metallische Leitfähigkeit) während der 1/g-Korrekturterm aus der Störungstheorie für die Leitfähigkeit folgt.

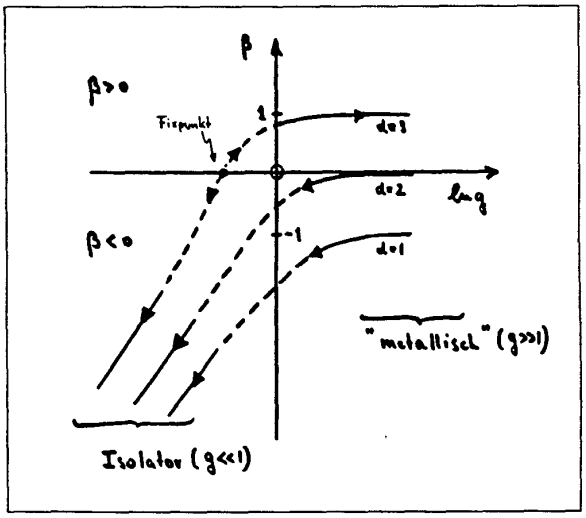

Abb. 16
Die β-Funktion für d = 1,2,3 Dimensionen

Mit Hilfe der Resultate (41), (42) für β in den Grenzfällen $g \ll 1$ und $g \gg 1$ können wir versuchen, auf den gesamten Verlauf von $\beta(g)$ für **alle** g zu schließen. Dies ist in Abb. 16 dargestellt, wo $\beta(g)$ gegen ln g aufgetragen ist. Links und rechts sind die berechneten Grenzfälle (Isolator und „metallischer" Bereich) mit durchgezogenen Kurven dargestellt. Wichtig ist, daß sich wegen des negativen Vorzeichens des 1/g-Korrekturterms in (42) alle β-Kurven für $g \gg 1$ leicht nach unten neigen, sich also zu kleineren g hin kontinuierlich von dem Grenzwert d-2 entfernen. Man kann deshalb für den unbekannten Zwischenbereich eine vernünftige Annahme machen[12], daß nämlich auch dort die β-Kurven einen glatten und monotonen Verlauf haben (gestrichelte Kurve in Abb. 16). Abb. 16 entspricht einem Flußdiagramm, das das Verhalten des Systems bei einer Systemvergrößerung widerspiegelt. Dieses Verhalten ist für $d \leq 2$ charakteristisch von dem für $d > 2$ unterschieden: (i) $\mathbf{d \leq 2}$; In diesem Fall ist β **immer** negativ. Da β die Änderung des Leitvermögens g mit der Systemgröße L beschreibt, heißt das $dg/dL < 0$. Eine Vergrößerung von L führt also, unabhängig vom Anfangswert, immer zu einer Verringerung von g: die Kurven „fließen" immer nach links unten (siehe Pfeile), d.h. in den Isolatorbereich. Für $d \leq 2$ und $L \to \infty$ sind also alle Zustände lokalisiert; die Systeme zeigen Isolatorverhalten.

Das beantwortet die ursprüngliche Frage nach der Möglichkeit metallischer Leitfähigkeit sehr dünner Filme (d = 2) bei T = 0: wir finden, daß eine echte metallische Leitfähigkeit in d = 2 nicht möglich ist. (ii) $\mathbf{d > 2}$; hier treten beide Möglich-

keiten, $\beta > 0$ und $\beta > 0$ auf, da die β-Funktion eine Nullstelle bei $g = g_c$ hat. Für Systeme mit einem Anfangs-Leitwert $g < g_c$ (d.h. einer Unordnungskonzentration $\lambda > \lambda_c$, wobei $g(\lambda_c) = g_c$ ist) gilt $\beta < 0$, d.h, eine Vergrößerung des Systems führt wieder zu einem Isolator-Verhalten (Fluß der Kurven nach links unten). Ein Anfangswert g mit $g > g_c$ (d.h. $\lambda < \lambda_c$) bedeutet dagegen $\beta > 0$, so daß eine Vergrößerung von L das System in den **metallischen** Bereich treibt, nämlich nach rechts oben. Der Punkt $\beta(g_c) = 0$ heißt „Fixpunkt", da sich g dort bei Veränderung von L selbst nicht ändert. Dieser Punkt stellt den Metall-Isolator (d.h. Anderson-Übergang) dar. Für $d > 2$ gibt es also einen Übergang bei einem endlichen g_c, d.h. einer endlichen Verunreinigungskonzentration λ_c. Je nach der Unordnung sind Zustände entweder ausgedehnt oder lokalisiert.

In der Nähe des Übergangs $\beta(g_c) = o$ kann man die β-Funktion linearisieren und erhält

$$\beta \simeq \frac{1}{\nu}\frac{g-g_c}{g_c} \tag{43}$$

wobei $1/\nu$ die Steigung von β in Abb. 16 bei $g = g_c$ ist. Gl.(43) läßt sich dann integrieren:

$$\frac{L}{L_o} = \left(\frac{g-g_c}{g_o-g_c}\right)^{\nu} \tag{44}$$

wobei $g_o \equiv g(L_o)$. Im lokalisierten Bereich ($g, g_o < g_c$) findet man das Verhalten

$$g \simeq g_o\,[1-(L/\xi)^{1/\nu}] \tag{45}$$

mit der Lokalisierungslänge ξ. Wenn $t \equiv (g_o-g_c)/g_c = (\lambda-\lambda_c)/\lambda_c$ die Unordnung des Systems relativ zu dem jeweiligen kritischen Wert g_c bzw. λ_c mißt („reduzierte Kopplungskonstante"), so gilt

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \tag{46}$$

Die Zahl ν ist also gerade der „kritische Exponent" der Lokalisierungslänge ξ. Gl.(46) bedeutet, daß ξ bei Annäherung an die kritische Unordnung ξ_c divergiert und damit die **einzig** relevante Länge im System ist.

Die metallische Seite ($g, g_o > g_c$) ist dagegen durch eine Gleichstromleitfähigkeit $\sigma(0)$ charakterisiert, für die man mit Hilfe von (37)

$$\sigma(0) \propto t^{\nu(d-2)} \tag{47}$$

erhält. Der kritische Exponent von $\sigma(0)$, genannt s (wegen der Definition $\sigma(0) \propto t^s$), lautet dann

$$s = (d-2)\nu \tag{48}$$

Diese Beziehung verknüpft also zwei kritische Exponenten, von denen der eine (s) das Verhalten im metallischen und der andere (ν) das Verhalten im Isolator-Bereich nahe dem Übergang beschreibt. Die „Skalenrelation" (48) wurde zuerst von Wegner[23], 1976, im Rahmen einer für die Anderson-Lokalisierung grundlegenden Arbeit über den Zusammenhang zum Problem kritischer Phänomene, aufgestellt.

Durch Integration von (42) erhält man einen (zumindest für Dimensionen $d-2 \equiv \varepsilon \ll 1$ gültigen) expliziten Wert für s, nämlich $s = 1$[12,23]. Dieses Ergebnis scheint selbst noch für $d = 3$ zu gelten.

Feldtheoretische Methoden haben auch im Fall magnetischer Verunreinigungen und der dadurch auftretenden Spinstreuung zu einer Skalentheorie geführt[18-21]. Ihre Resultate sind den zuvor besprochenen qualitativ sehr ähnlich. Insbesondere wird auch hier ein Anderson-Übergang für $d < 2$ erwartet, während für $d > 2$ alle Zustände lokalisiert sind.

Die Tatsache, daß die störungstheoretische Korrektur durch die Spinstreuung proportional zu λ^2 ist (statt λ, wie bei der normalen Streuung) äußert sich dabei auch in den kritischen Eigenschaften: der Leitfähigkeitsexponent s ergibt sich hier zu $s = 1/2$ statt zu $s = 1$.

Gleichung (47) impliziert, daß die Gleichstromleitfähigkeit $\sigma(0)$ bei Erhöhung der Unordnungskonzentration **kontinuierlich** gegen Null geht. Das Resultat widerspricht der Mott'schen Annahme einer „minimalen metallischen Leitfähigkeit" und eines damit verbundenen diskontinuierlichen Übergangs. Auf seine experimentelle Bestätigung werden wir später noch eingehen.

Die Methode der Selbstkonsistenz

Die eben beschriebene Theorie[12] basiert auf der Annahme der Ein-Parameter Skalenbeziehung (40), die sich in diesem Rahmen nicht weiter beweisen läßt.

Ein ganz anderes theoretisches Konzept, mit dem man versuchen kann, den Anderson-Übergang und seine kritischen Eigenschaften zu beschreiben, und das keinerlei Skalenannahme macht, ist das der sog. „Selbstkonsistenz"[24]. Innerhalb seines Rahmens wird versucht, die frequenzabhängige Leitfähigkeit $\sigma(\omega)$ bzw. den Diffusionskoeffizienten $D(\omega)$ mittels einer nicht-trivialen Beziehung durch sich selbst wieder auszudrücken, also eine Gleichung der Art

$$D(\omega) = F[D(\omega)] \tag{49}$$

zu finden, deren selbstkonsistente Lösung dann $D(\omega)$ (für alle $\omega \geq 0$ und Unordnungskonzentrationen λ) liefert. Dabei ist wichtig, daß man mit den Ergebnissen der Störungstheorie für $\lambda \ll 1$ übereinstimmt, so daß die Theorie mindestens in diesem Grenzfall an exakten Resultaten verankert werden kann[13]. Durch die Selbstkonsistenz wird dann versucht, über die Störungstheorie hinaus zu gehen und auf diese Weise zum Übergang selbst (und sogar darüber hinaus) zu gelangen. Die Selbstkonsistenz, d.h. die Form der Gleichung (49), ersetzt dann eine (nicht durchführbare) Störungstheorie unendlicher Ordnung.

Da $D(\omega)$ am Übergang verschwindet, dort also $D_o/D(\omega)$ divergiert, hat es sich im Rahmen einer diagrammatischen Störungstheorie als zweckmäßig erwiesen, eine selbstkonsistente Berechnung der Größe $D_o/D(\omega)$ durch Aufsummation der größten Beiträge (d.h. der stärksten Divergenzen) der Störungstheorie durchzuführen[13,25]. Es läßt sich auf diese Weise tatsächlich eine selbstkonsistente Gleichung ableiten. Sie hat die einfache Gestalt

$$\frac{D_o}{D(\omega)} = 1 + \frac{1}{\pi N_F}\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d}\,\frac{1}{-i\omega + D(\omega)k^2} \tag{50}$$

d.h. $D_o/D(\omega)$ ist durch das Integral über einen Diffusionspol mit dem Diffusionskoeffizienten $D(\omega)$ selbst (und nicht nur der Diffusions**konstanten** D_o) gegeben. Diese Gleichung läßt sich auch mit Hilfe anderer Methoden erhalten[25-29]. Ihre Lösung ergibt, daß die Gleichstromleitfähigkeit $\sigma(0)$ für $d \leq 2$ immer verschwindet, d.h. daß selbst bei beliebig kleiner Unordnung alle Zustände lokalisiert sind (Isolator-Verhalten). In $d = 2$ ist die Lokalisierungslänge ξ für $\lambda \ll 1$ allerdings exponentiell groß[13]

$$\xi \propto \exp\,(1/2\,\lambda) \tag{51}$$

Für $d > 2$ gibt es dagegen einen kritischen Wert der Unordnung, unterhalb dessen $\sigma(0)$ endlich ist (metallischer Bereich), während $\sigma(0)$ oberhalb davon verschwindet (Isolator). Da man in dieser Theorie den Grenzwert $\omega \to 0$ explizit durchführen kann, erhält man Ergebnisse, die über den Aussagebereich der oben beschriebenen Skalentheorie hinausgehen ($\omega \to 0$ bedeutet, daß man sich aus dem

kritischen Bereich entfernt). Im übrigen ergibt sich völlige Übereinstimmung mit den Resultaten der Skalentheorie, insbesondere findet man auch die Skalenrelation (48) und den Wert $s = 1$ für $2 < d < 4$. Tatsächlich kann man zeigen, daß (50) selbst Skaleneigenschaften besitzt und die selbstkonsistente Theorie deshalb auch eine Skalentheorie ist[25,27,30,31]. Nach Ausführen des Integrals in (50) und der Wahl geeigneter Einheiten, die zu dimensionslosen Größen G und z statt D und ω führen, läßt sich (50) schreiben als[25]

$$\frac{d-2}{r_d} G = \pm z^{\frac{2-d}{d}} + G^{\frac{2-d}{2}} \qquad (52)$$

wobei das Plus-(bzw. Minus-) Zeichen für die metallische (bzw. Isolator-) Phase gilt und r_d eine dimensionsabhängige Konstante ist. Da in (52) keine Systemparameter (k_F, m,λ etc.) explizit vorkommen, diese also alle in der Skala für D und ω enthalten sind, handelt es sich um eine „Skalengleichung". Sie beschreibt eine **universelle** Abhängigkeit der Leitfähigkeit von der Frequenz. Es wird dadurch eine vollständige und glatte Kurve für die Funktion definiert[31].

Eine feldtheoretische Analyse[29] des vorliegenden Problems zeigt, daß (52), sofern eine störungstheoretische Behandlung überhaupt zulässig ist, mindestens in der Nähe von $d = 2$ eine **exakte** Beziehung darstellt[32].

Abschließend läßt sich sagen, daß trotz einiger noch offender Fragen diese Anderson-Lokalisierung, d.h. das Verhalten nichtwechselwirkender Teilchen in einem ungeordneten Medium, theoretisch und experimentell recht gut verstanden zu sein scheint.

II. Wechselwirkende, quantenmechanische Teilchen in ungeordneten Systemen

In der bis jetzt diskutierten Theorie der Anderson-Lokalisierung wurde die elastische Streuung **nicht**-wechselwirkender, quantenmechanischer Teilchen an Verunreinigungen betrachtet. Wenn man ihre Resultate allerdings experimentell überprüfen will, so hat man es immer mit Systemen zu tun, in denen die Teilchen auch selbst untereinander wechselwirken. Das wohl wichtigste Beispiel dafür sind Elektronen in einem gestörten Metall. Selbst wenn man in jedem Fall annehmen dürfte, daß die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen durch Abschirmungseffekte stark abgeschwächt wird, stellt sich immer noch die Frage nach ihrem qualitativen und quantitativen Einfluß im Vergleich mit den Effekten der Lokalisierung[3,33].

In der reinen Elektron-Elektron Wechselwirkung herrscht Impulserhaltung, sie trägt daher nicht zum metallischen Widerstand bei. Wichtig sind deshalb nach wie vor Impuls**änderungen** der Teilchen durch Streuung an Verunreinigungen etc.. Um diese Effekte zu verstehen, betrachten wir die inelastische Wechselwirkung der Elektronen untereinander[34]. Sie ist durch einen Impulsübertrag q (mit $ql \ll 1$) und einen Energieübertrag $\hbar\omega$ (mit $\omega\tau \ll 1$) charakterisiert, wobei l und τ die mittlere freie Weglänge und die mittlere Zeit zwischen Stößen der Elektronen an den Störstellen ist. Es läßt sich dann eine „Wechselwirkungszeit" $t_o \equiv 2\pi/\omega$ definieren, für die offensichtlich $t_o \gg \tau$ gilt. Während der Wechselwirkungszeit t_o kommt es also zu vielen Streuungen an den Verunreinigungen, was wiederum zu einer qualitativen Änderung der Wechselwirkung führt. Die „nackte" Wechselwirkung wird dadurch zu einer „effektiven" Wechselwirkung, deren Charakter vom Energieübertrag $\hbar\omega$ abhängt. Diese Effekte führen zu einer Korrektur $\delta\sigma$ der (metallischen) Leitfähigkeit eines Systems bzw. zu einer Korrektur δN der Zustandsdichte an der Fermikante.

Abschätzung der Korrekturen

Bei der störungstheoretischen Berechnung der Korrekturen zu σ in niedrigster Ordnung λ fanden Altshuler und Aronov[34], daß sie erstaunlicherweise dieselbe Gestalt wie die im **nicht**-wechselwirkenden Fall haben. In $d = 2$ gibt es also ebenfalls eine logarithmische Temperaturabhängigkeit von $\delta\sigma$, obwohl quantenmechanische Interferenzprozesse, die zu (19) bzw. (21) führen, von diesen Autoren gar nicht betrachtet worden waren. Wenn dabei ursprünglich vielleicht an einen Zufall geglaubt wurde, so wissen wir doch heute, daß diese Resultate einzig und allein auf der Unordnung im System beruhen. Sie führt zum Diffusionsverhalten der Teilchen und bewirkt so eine Änderung der Wechselwirkung (Abschirmung) durch Dichtefluktuationen. Auf diese Weise wird die langreichweitige, nackte Wechselwirkung zwischen den Elektronen zu einer kurzreichweitigen effektiven Wechselwirkung.

Dazu betrachten wir die inelastische Streuung zwischen zwei Elektronen der Energie ε (gerechnet von der Fermienergie E_F), genauer gesagt: zwischen einem Teilchen und einem Loch, bei der es zu einem Energieübertrag $h\omega$ mit $\hbar\omega \simeq \varepsilon$ komme[35]. Nach der Unschärferelation bleiben die Teilchen für Zeiten $t \lesssim \hbar/\varepsilon$ in zueinander kohärenten Zuständen – während dieser Zeit ist Interferenz möglich. Bei einer kurzreichweitigen Wechselwirkung ist es dabei allerdings notwendig, daß sich die zwei Teilchen während $t \lesssim \hbar/\varepsilon$ auch wirklich am selben Ort aufhalten. Die Wahrscheinlichkeit dafür werde mit $W(\varepsilon)$ bezeichnet. Die kurzreichweitige Wechselwirkung Λ wird dann ihrerseits zu einer effektiven Wechselwirkung

$$\Lambda_{eff} = \Lambda(1 + W(\varepsilon)) \qquad (53)$$

Um $W(\varepsilon)$ abzuschätzen, beachten wir, daß die Bewegung der Teilchen durch die Diffusion bestimmt ist, d.h.

$$W(\varepsilon) \propto \int_{\tau}^{\hbar/\varepsilon} \frac{dt}{(D_o t)^{d/2}} \qquad (54)$$

Der Integrand in (54) ist, genau wie im Lokalisierungsproblem, durch $1/V_{diff}$, (15), gegeben. Deshalb führt das Integral zu derselben dimensionsbedingten Struktur wie in (20). In $d = 2$ erhält man speziell

$$W(\varepsilon) \propto \ln(\hbar/\varepsilon\tau) \qquad (55)$$

Wir nehmen nun an, daß die dadurch hervorgerufenen relativen Korrekturen physikalischer Größen in niedrigster Ordnung λ durch

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_o}, \frac{\delta N(\varepsilon)}{N_F} \propto \delta\Lambda_{eff} = \Lambda W(\varepsilon) \qquad (56)$$

gegeben wird. Speziell für die Zustandsdichte in $d = 3$ erhält man dann

$$\delta N(\varepsilon) \propto \Lambda \sqrt{|\varepsilon|} \qquad (57)$$

Bei abstoßender Wechselwirkung ($\Lambda > o$) nimmt die Zustandsdichte in der Nähe der Fermioberfläche also ab und hat bei E_F (d.h. $\varepsilon = o$) eine nach unten gerichtete, nichtanalytische Spitze. Dieses Verhalten ist bei Tunnelexperimenten, in denen die zur Zustandsdichte proportionale Tunnelleitfähigkeit dI/dV in Abhängigkeit von der Spannung V (statt der Energie ε) gemessen wird, auch beobachtet worden[35]; siehe Abb. 17.

Für die Leitfähigkeitskorrektur bei endlichen Temperaturen T ersetzen wir ε durch T in (54) und erhalten

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_o} \propto \Lambda \begin{cases} \ln \frac{\hbar/\tau}{k_B T} & d = 2 \\ T^{d/2-1} & d \neq 2 \end{cases} \qquad (58)$$

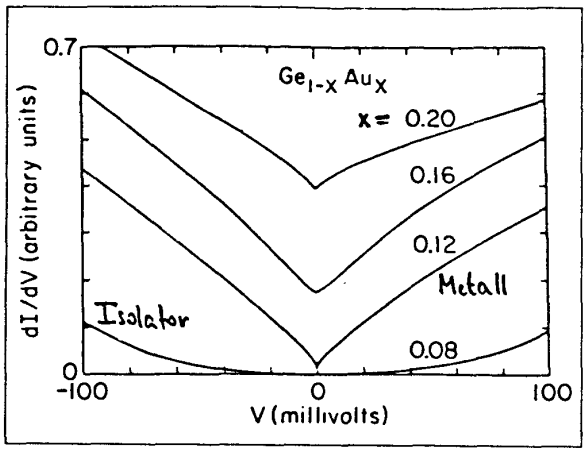

Abb. 17
Änderung der Zustandsdichte nahe der Fermienergie in d = 3 (Ref.36)

Die Temperaturabhängigkeit von $\delta\sigma$ ist also mit der schwachen Lokalisierung identisch, obwohl die dort entscheidende **quantenmechanische** Interferenz durch Rückwärts-Streuung in (58) gar nicht berücksichtigt wurde. Tatsächlich führen „Cooperonen" in diesem Fall nur zu einer unwesentlichen Änderung des Ergebnisses in (58)[37].

Die hier auftretenden Singularitäten an der Fermikante zeigen, daß Unordnung, entgegen einer lange Zeit vorherrschenden Meinung, zu wesentlichen Änderungen in den physikalischen Eigenschaften einer Fermiflüssigkeit führt. Mittlerweile gibt es sogar eine exakte Lösung des Wechselwirkungsproblems mindestens in niedrigster Ordnung der Verunreinigungen ($\lambda \ll 1$)[38], die sich auch im Rahmen eines Fermiflüssigkeitstheorie verstehen läßt[39]. Insofern ist für den Fall schwacher Unordnung eine befriedigende Situation erreicht.

Der Metall-Isolator Übergang

Um über die Störungstheorie hinaus zu kommen und Aussagen über den Metall-Isolator Übergang und seine kritischen Eigenschaften machen zu können, bedarf es wieder einer Skalentheorie bzw. aufwendiger mathematischer Methoden. Zur Zeit werden dabei sowohl feldtheoretische Untersuchungen wie auch Renormierungsgruppen-Analysen des Übergangs in der Nähe von d = 2 Dimension durchgeführt[40,41]. Sie haben allerdings bisher nur in den Spezialfällen starken äußeren Magnetfelds bzw. magnetischer Spinstreuung zu schlüssigen Ergebnissen geführt. In diesen Fällen soll es, wie bereits in der Anderson-Lokalisierung, nur deshalb von zwei Dimensionen einen Übergang geben, in dessen Nähe die Gleichstromleitfähigkeit **linear** in $\lambda_c - \lambda$ verschwindet (kritischer Exponent s = 1, d.h. wie in der Anderson-Lokalisierung **ohne** Magnetfeld oder Spinstreuung). Das allgemeine Verhalten ist dagegen noch unverstanden. Im Fall fehlenden Magnetfelds bricht die Renormierungsgruppen-Behandlung nämlich vor Erreichen des Metall-Isolator Übergangs zusammen[40,41]. Der Grund hierfür liegt in dem Auftauchen lokaler magnetischer Momente (Spin-Fluktuationen), die für $T \to 0$ zu einer Divergenz der Spin-Suszeptibilität führen.

Auch die Lokalisierungseffekte durch Quanteninterferenz, die zur Anderson-Lokalisierung, d.h. zum Übergang im wechselwirkungsfreien System führen, sind noch nicht allgemein berücksichtigt worde. Der Metall-Isolator Übergang des wechselwirkenden Systems ist deshalb noch nicht gut verstanden.

Experimente und Vermutungen

In Experimenten nähert man sich dem Übergang üblicherweise nicht durch Erhöhung der Unordnung λ auf λ_c sondern mittels Erniedrigung der **Teilchendichte** n . In Halbleitern läßt sich das z.B. durch eine Änderung der Dotierung bewerkstelligen. Auf diese Weise wird die Energie der Teilchen

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3} \qquad (59)$$

absenkt. Wenn wir die kritische Energie, bei der der Übergang erfolgt, mit $E_c = E(n_c)$ bezeichnen, so ist das System für Dichten $n > n_c$ (d.h. $E > E_c$) im metallischen und für $n < n_c$ (d.h. $E < E_c$) im Isolator-Bereich.

Da das allgemeine Verhalten des Übergangs noch unverstanden ist, haben auch entsprechende Experimente noch keine schlüssigen Erklärungen gefunden[42]. Im dreidimensionalen Proben findet man nämlich, daß in einer Gruppe von Systemen (z.B. amorphem Nb_xSi_{1-x} oder kompensiertem Ge:Sb) die Gleichstromleitfähigkeit linear in $n-n_c$ verschwindet (d.h. s = 1, siehe Abb. 18a), während sie in einer anderen Gruppe (z.B. Si:P oder unkompensiertem Ge:Sb) mit einem Wurzelverhalten (d.h. s = 1/2, siehe Abbildung 18b) zu Null geht. Im zweiten Fall liegt daher eine Situation vor wie man sie in einem **nicht**-wechselwirkenden System mit magnetischen Streuzentren erwarten würde. (Die Leitfähigkeit geht also **kontinuierlich** gegen Null; in beiden Fällen werden Werte gemessen, die deutlich unterhalb der von Mott postulierten „minimalen metallischen Leitfähigkeit" σ_{min} liegen (siehe Pfeile in den beiden Abbildungen)). Der Grund für dieses unterschiedliche Verhalten ist noch nicht wirklich verstanden. Es lassen sich aber Vermutungen anstellen, da sich die beiden Gruppen von Systemen in einem Punkt wesentlich voneinander unterscheiden[45]. Die Systeme mit s = 1/2 haben nämlich **ein** Valenzelektron pro Streuzentrum. (Im Fall von Si:P gibt z.B. jedes P ein zusätzliches Valenzelektron an das Elektronsystem ab, während die P-Ionen die zufallsverteilten Potentiale darstellen, an denen die Elektronen streuen). Dagegen kommen in den Systemen mit s = 1 auf ein Elektron mehrere Streuzentren. (Bei dem kompensierten Ge:Sb werden gleiche Mengen Sb und B zugefügt, die dann ein Elektron austauschen und dadurch zwar keine zusätzlichen Ladungsträger aber zusätzliche Streuzentren betragen). Es läßt sich nun spekulieren, daß die zusätzlichen Streuzentren zu einer verstärkten Streuung der Elektronen führen und es sich bei dem Leitfähigkeitsverhalten mit s = 1 deshalb im wesentlichen um den Anderson-Übergang handelt. Allerdings ist s = 1 auch mit der Wechselwirkungstheorie für Systeme mit starker Spinstreuung kompatibel. In der ersten Systemgruppe mit s = 1/2 ist die Situation allerdings noch unklarer. Das Verhalten s = 1/2 ergibt sich theoretisch bisher nur für **nicht**-wechselwirkende Systeme mit starker Spinstreuung. In Si:P tragen aber nur die Elektronen einen Spin. Es könnte nun sein, daß die lokalen magnetischen Momente (Spin-Fluktuationen), auf die die Renormierungsgruppen-Rechnungen für das wechselwirkende System gestoßen sind (und die zu ihrem ultimativen Zusammenbruch führen), **selbst** als Spin-Streuzentren wirken[45]. Die Wechselwirkung würde dann also – durch ein kollektives Verhalten der Elektronen – für die Existenz magnetischer Momente sorgen, an der die Elektronen selbst streuen. Ansonsten fänden die Elektronen aber ein nichtwechselwirkendes System vor. Auf diese Weise ließe sich s = 1/2 erhalten. Tatsächlich wird dieses Bild durch verschiedene Messungen der spezifischen Wärme

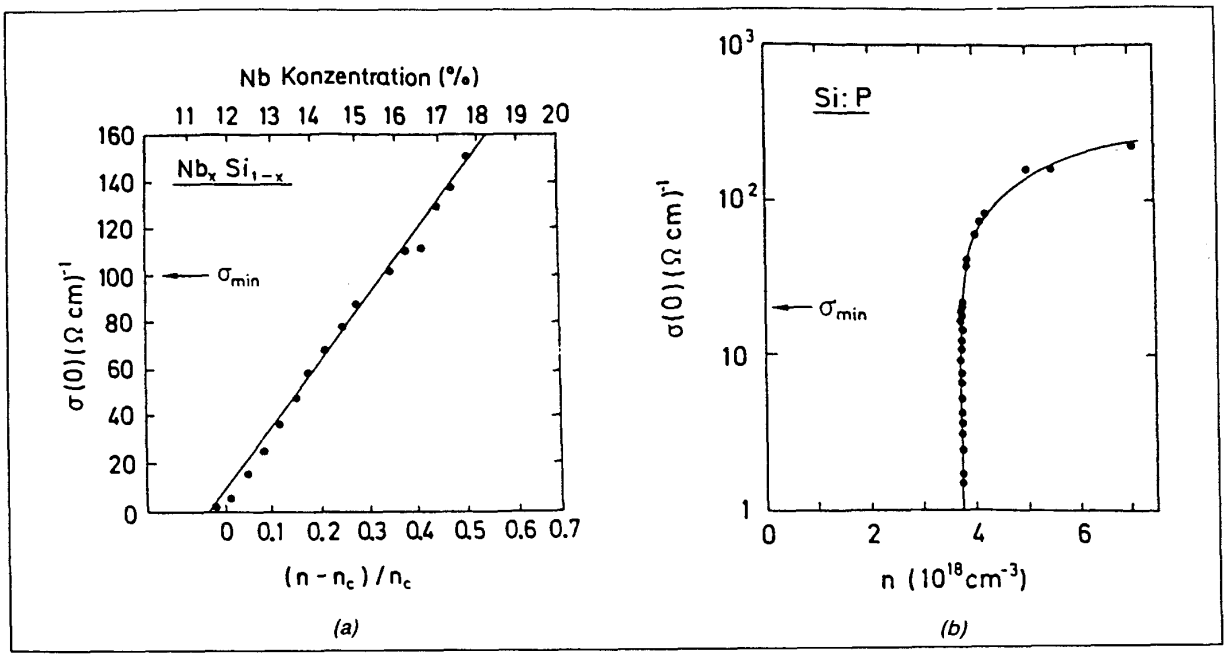

Abb. 18
Leitfähigkeit verschiedener Systeme am Metall-Isolator Übergang, (a) s = 1 (Ref.43), (b) s = 1/2 (Ref.42)

und der Spin-Suszeptibilität erhärtet[42]. Man findet dabei eine starke Erhöhung dieser beiden Größen für T → 0, die sich durch eine stark erhöhte effektive Messe erklären lassen. Hier scheint ein enger Zusammenhang zur Theorie stark korrelierten („fast lokalisierter") Fermisysteme zu bestehen, die auch im flüssigen ^{3}He Anwendung findet[46]. Auf diese Weise kommt es gerade in der letzten Zeit zu bemerkenswerten Verknüpfungen zwischen scheinbar ganz unterschiedlichen Gebieten: dem Problem ungeordneter Systeme, der Fermiflüssigkeitstheorie, der Theorie stark korrelierter Fermisysteme und, nicht zuletzt, der Supraleitung. Man kann sicher sein, daß sich aus dieser Verbindung auch weiterhin neue und unvermutete Erkenntnisse gewinnen lassen.

Literatur

[1] O. Madelung; Introduction to **Solid State Physics;** Springer Series in Solid State Sciences, Bd. 2; Springer, Berlin (1978)

[2] Siehe den Sammelband **Anderson Localization,** Hrsg. Y. Nagaoka und H. Fukuyama, Springer Series in Solid State Sciences, Bd. 39, Springer, Berlin (1982).

[3] P.A. Lee und T.V. Ramakrishnan, „Disordered Electronic Systems", Rev. Mod. Phys. (im Druck, erscheint voraussichtlich Jan. 1985)

[4] P.W. Anderson; Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)

[5] N.F. Mott; Phil. Mag. **26**, 1015 (1972)

[6] Eine Darstellung der historischen Entwicklung dieses Konzepts und des Lokalisierungsproblems aus persönlicher Sicht findet man in N.F. Mott; Rep. Progr. Phys. **47**, 909 (1984).

[7] S.F. Edwards; Phil. Mag. 8, 1020 (1958)

[8] Wir folgen hier der Diskussion von D.E. Khmelnitskii in **Proc. of 17. Intern. Conf. on Low Temp. Phys. (LT-17)**; Physica **126 B+C**, 235 (1984).

[9] D. Forster, **Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry and Correlation Functions**; Benjamin, Reading (1975)

[10] Siehe z.B. S. Doniach und E.H. Sondheimer; **Green's Functions for Solid State Physicists**; Benjamin Reading (1974)

[11] J.S. Langer und T. Neal; Phys. Rev. Lett. **16**, 984 (1966)

[12] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, und T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)

[13] D. Vollhardt und P. Wölfle; Phys. Rev. Lett. **45**, 482 (1980); Phys. Rev. **B22**, 4666 (1980)

[14] L.P. Gor'kov, A.J. Larkin und D.E. Khmelnitskii, JETP Lett. **30**, 248 (1979)

[15] G.J. Dolan und D.D. Osheroff; Phys. Rev. Lett. **43**, 721 (1979)

[16] G. Bergmann; Phys. Rep. **107**, 1 (1984)

[17] P.A. Lee; J. Noncryst. Solids, **35**, 21 (1980)

[18] F. Wegner, Z. Phys. **B35**, 207 (1979)

[19] S. Hikami, A.I. Larkin und Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980)

[20] Siehe z.B. Ref. 3, sowie F. Wegner und S. Hikmni in Ref. 2

[21] R. Oppermann und K. Jüngling; Phys. Lett. **76A**, 449 (1980)

[22] D.J. Thouless; Phys. Rep. **13C**, 93 (1984); Phys. Rev. Lett. **39**, 1167 (1977)

[23] F. Wegner; Z. Phys. B25, 327 (1976)

[24] Es wurde zuerst von W. Götze; Solid State Comm. **27**, 1393 (1978); Phil. Mag. 43, 219 (1981) in das Lokalisierungsproblem eingeführt.

[25] P. Wölfle und D. Vollhardt; In Ref. 1

[26] P. Prelovsek; in **Recent Developments in Condensed Matter Physics**, Hrsg. J.T. Devreese (Plenum Press, New York, 1981). Vol.II, S. 191

[27] D. Belitz, A. Gold und W.H. Götze; Z. Phys. **B44**, 273 (1981)

[28] C.S. Ting; Phys. Rev. **B26**, 678 (1982)

[29] S. Hikami, in Ref. 2

[30] B. Shapiro; Phys. Rev. **B25**, 4266 (1982)

[31] D. Vollhardt und P. Wölfle; Phys. Rev. Lett. **48**, 699 (1982)

[32] Ich danke Prof. D.J. Amit für eine Diskussion und Klarstellung dieses Punktes

[33] Für zusammenfassende Darstellungen zum Wechselwirkungs-Problem sei hier auch auf das noch zu erscheinende Buch **Electron-Electron Interaction in Disordered Systems**, Hrsg. H. Pollak und A.L. Efros; North Holland, Amsterdam (1984/1985) verwiesen

[34] B.L. Altshuler und A.G. Aronov; Zh. Eksp. Teor. Fiz. **77**, 2028 (1978) [Sov. Phys. JETP **50**, 968 (1980)].

[35] Wir folgen hier der Diskussion von A.G. Arono in **Proceedings of LT-17** Physica **126 B+C**, 314 (1984) bzw. dem Artikel von B.L. Altshuler und A.G. Aronov in Ref. 33

[36] W.L. McMillan und J. Mochel; Phys. Rev. Lett. **46**, 556 (1981)

[37] Y. Isawa and H. Fukuyama; J. Phys. Soc. of Japan; **53**, 1415 (1983)

[38] A.M. Finkelstein; Zh. Eksp. Teor. Fiz. **84**, 168 (1983) (Sov. Phys. JETP **57**, 97 (1983))

[39] B.L. Altshuler und A.G. Aronov; Solid State Comm. **46**, 429 (1983)

[40] A.M. Finkelstein; Z. Phys. **B56**, 189 (1984)

[41] C. Castellani, C. DiCastro, P.A. Lee und M. Ma; Phys. Rev. **B30**, 1596 (1984)

[42] Eine ausführliche Diskussion experimenteller Ergebnisse findet man in T.F. Rosenbaum, R.F. Milligan, M.A. Paelanen, G.A. Thomas, R.N. Bhatt und W.Lin; Phys. Rev. **B27**, 7509 (1983)

[43] B. Hertel, D.J. Bishop, E.G. Spencer, J.M. Rowell und R.C. Dynes; Phys. Rev. Lett. **50**, 743 (1983)

[44] G.A. Thomas (unveröffentlicht); siehe auch die Beiträge zu der Konferenz in Santa Cruz im Sommer 1984 über ;Doped Semiconductors etc.;, die in ;Solid State Electronics; erscheinen werden.

[45] E. Abrahams, M.T. Rice (private Mitteilungen) und Beiträge zu dem Santa Cruz-Treffen; siehe Ref. 44.

[46] D. Vollhardt; Rev. Mod. Phys. **56**, 99 (1984)