

Classification
 Physics Abstracts
 71.50 — 71.25

LOCALISATION DES ÉLECTRONS DANS LES ALLIAGES BINAIRES

R. ABOU-CHACRA, E. CHAMOUN et N. HOMAIDAN (*)

Faculté des Sciences, Université Libanaise, Hadeth, Beyrouth, Liban

(Reçu le 18 juillet 1977, révisé le 2 novembre 1977, accepté le 22 février 1978)

Résumé. — La théorie de self-consistence est appliquée au problème de l'alliage binaire. On considère les atomes du type A en minorité avec une concentration $c \ll 1$. La théorie est appliquée au premier ordre en c et l'équation intégrale qui en découle est résolue numériquement pour $Z = 3$, $Z = 4$. Les résultats obtenus pour le bord de localisation E_c sont améliorés par rapport à ceux obtenus antérieurement et en meilleure concordance avec d'autres théories.

Abstract. — The self-consistent theory is applied to the problem of binary alloy. We consider the atoms of type A as minority with a concentration $c \ll 1$. We apply the theory to first order in c , and the integral equation is solved numerically for $Z = 3$, $Z = 4$. The results obtained for the localization edge E_c are an improvement on previous work and in better agreement with the results predicted by other theories.

1. Introduction. — La méthode de self-consistence de l'étude de localisation des électrons dans un système désordonné est à la base de ce travail [1] et [2]. C'est une méthode exacte pour le réseau de Bethe et une méthode d'approximation pour un matériel réel.

La méthode est basée sur l'étude de l'équation de l'énergie propre

$$S_i = \sum_j \frac{|V_{ij}|^2}{E - \varepsilon_j - S_j} \quad (1.1)$$

où ε_j sont des variables aléatoires de probabilité $p(\varepsilon)$. L'interaction est entre premiers voisins seulement, $V_{ij} = V$ pour i et j voisins et zéro ailleurs. La somme contient K termes avec $K = Z - 1$ et Z est le nombre des premiers voisins. S_i est un nombre complexe, mais pour les états localisés la partie imaginaire de S_i tend vers zéro lorsque la partie imaginaire de E tend vers zéro. Le problème de consistance est de trouver une fonction densité de probabilité de S_j qui, une fois utilisée dans la somme à droite, redonne la même probabilité pour S_i .

On a trouvé [2] que la stabilité d'une telle solution est équivalente à l'existence d'une solution $A(x)$ pour l'équation intégrale homogène :

$$A(y) = KV \int Q \left(y + \frac{V^2}{x} \right) \frac{A(x)}{|x|} dx \quad (1.2)$$

où $Q(x)$ est la probabilité de la variable

$$x = E - \varepsilon_i - \sum_j' \frac{V^2}{E - \varepsilon_j - E_j}. \quad (1.3)$$

La somme dans cette expression contient $K - 1$ termes. $p(\varepsilon)$ dépend d'un paramètre W , suivant la valeur de E , (1.2) admet ou n'admet pas une solution, ce qui détermine une valeur critique E_c pour chaque W et permet de tracer E_c en fonction de W .

Nous allons appliquer ceci sur les alliages binaires, ensuite procéder à des calculs numériques pour résoudre l'équation fonctionnelle qui en découle.

2. L'alliage binaire. — On considère l'alliage binaire formé de deux types d'atomes A et B. On suppose que la concentration d'atomes A est c avec une énergie 0 et que la concentration des atomes B est $(1 - c)$ avec une énergie W . Il est connu, [4], [5], que pour un tel système il y a deux bandes d'énergies. Donc pour étudier la localisation d'un état il faut prendre E dans les intervalles :

$$\begin{aligned} W - ZV &\leq E \leq W + ZV \\ -ZV &\leq E \leq +ZV. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Pour $c < 0,5$ la deuxième bande de (2.1) est dite la bande de minorités. Ainsi la probabilité des énergies des nœuds ε_i est

$$p(\varepsilon) = c \delta(\varepsilon) + (1 - c) \delta(W - \varepsilon). \quad (2.2)$$

(*) Conseil national de recherches scientifiques, Liban.

Dans ce qui suit on s'intéresse au cas où $c \ll 1$. Maintenant on doit trouver la probabilité $Q(x)$ de (1.3). Pour ceci on prend pour E_j dans le dénominateur de (1.3) la valeur R la plus probable de E_j . De (1.1) on tire cette valeur R

$$R = \frac{1}{2}(E - W) + \frac{1}{2}[(E - W)^2 - 4KV^2]^{1/2}. \quad (2.3)$$

Ceci pour $E < W$ c'est-à-dire dans la région correspondante à la bande de minorités.

Les ε qui figurent dans (1.3) sont au nombre de K et forment une suite dans l'ordre A-BABB... par exemple. Vu que les ε_i sont statistiquement indépendants, la probabilité d'une telle suite est

$$c^p(1 - c)^{K-p} \quad (2.4)$$

avec p le nombre des A dans la suite.

Si on travaille au premier ordre en c ($c \ll 1$), les seules suites probables sont celles qui contiennent au plus un seul atome A :

A-BBB...

B-BAB...

B-BBB...

avec pour chaque suite les permutations possibles qui ne changent pas la valeur de x .

D'où la probabilité de x

$$Q(x) = c \delta(a - x) + (K - 1) c \delta(b - x) + (1 - Kc) \delta(a - W - x) \quad (2.5)$$

avec

$$a = E - \frac{K - 1}{K} R$$

$$b = E - W - \frac{K - 2}{K} R - \frac{V^2}{E - R}. \quad (2.6)$$

L'équation intégrale (1.2) devient

$$A(y) = \frac{KVc}{|a - y|} A\left(\frac{V^2}{a - y}\right) + \frac{KV(K - 1)c}{|b - y|} A\left(\frac{V^2}{b - y}\right) + \frac{KV(1 - Kc)}{|a - W - y|} A\left(\frac{V^2}{a - W - y}\right). \quad (2.7)$$

C'est une équation fonctionnelle dont la solution analytique n'est pas évidente. Il faut noter ici que la méthode de Fredholm [3], [6] permet de donner une condition pour l'existence d'une solution de (1.2) ce qui détermine E_c en fonction de W, K, V . Cependant une telle méthode n'est pas à recommander vu la variation rapide de $Q(x)$.

Pour ce qui concerne la limite lorsque $W \rightarrow \infty$ c'est-à-dire les atomes A forment des îles isolées, l'équation (2.7) devient :

$$A(y) = \frac{cKV}{|a - y|} A\left(\frac{V^2}{a - y}\right) \quad (2.8)$$

et n'admet de solution que lorsque $cK < 1$; où on retrouve le même résultat que la théorie de percolation.

3. Solution numérique. — Vu la complexité analytique de l'équation (2.7) un calcul numérique a été fait pour résoudre cette équation. Avant de faire le calcul on a procédé, à l'aide d'un changement de variables, à la réduction de l'intervalle de y de $(-\infty, +\infty)$ à $(-1, 1)$.

Ensuite l'intervalle $(-1, 1)$ est divisé en N parties, où la fonction $A(y)$ est calculée aux $(N - 1)$ points correspondant à cette division. N est prise dans l'intervalle $N = 1\,000 - 2\,000$. Durant ce calcul, la valeur de V est prise comme unité.

La méthode itérative s'est révélée très efficace et de convergence rapide dans les régions des états localisés. Dans chaque cas, où les paramètres K, W, E sont fixés, on a fait varier N pour s'assurer que la convergence est indépendante de N . Les valeurs de la fonction $A(y)$ sont calculées avec une erreur inférieure à 1%. En gardant K et W constants et faisant varier E on a pu déterminer les valeurs de E pour lesquelles (2.7) admet une solution, c'est-à-dire les valeurs de E correspondant à des états localisés. Ce qui détermine par conséquent les valeurs E_c qui séparent les états localisés des états non localisés.

Comme échantillon de ce calcul on donne en figure 1 les régions des états localisés (parties hachurées) et des états non localisés, pour $K = 2$ et $c = 0,1$, ainsi que la variation de ces régions en fonction de W . On note d'abord que, pour W petit, les bords de localisation se forment aux voisinages de $-ZV = -3$ et $W + ZV$. Ensuite quand W augmente, une région intermédiaire d'états localisés commence à apparaître conduisant à deux gapes d'états non localisés. La gape de gauche se ferme quand W augmente ($W \simeq 3,3$). La gape de droite demeure pour les valeurs de W assez élevées ($W = 4, 5, 6, \dots$) et même après la séparation de la bande des majorités de la bande des minorités. Ainsi avec la fermeture de la gape de gauche on peut dire

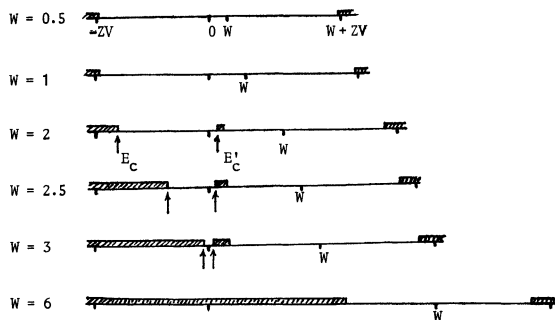


FIG. 1. — Schéma des résultats numériques indiquant les régions d'états localisés. Pour chaque valeur de W , les parties hachurées indiquent les régions des états localisés E pour $K = 2$ et $c = 0,1$.

[Scheme showing the numerical results of the localization regions. For each value of W the shaded regions represent the localized states E for $K = 2$ and $c = 0,1$.]

que tous les états de la bande des minorités sont localisés. On remarque aussi sur la figure 1 (ainsi que pour $K > 2$) que E_c et E'_c ne sont pas symétriques par rapport à 0 et que E_c tend vers zéro légèrement avant E'_c pour toute valeur de K . Donc la valeur de W qui rend $E_c = 0$ (pour $K = 2$, $W \simeq 3,1$) est en effet légèrement inférieure à la vraie valeur qui rend tous les états de la bande de minorités localisés.

On trace en figure 2 la variation de E_c (en valeur absolue) en fonction de W pour $c = 0,1$. La courbe (a) est pour $K = 2$ et la courbe (b) pour $K = 3$. Les courbes E_c sont tracées comme continues vu que le nombre des valeurs calculées pour E_c est grand : un point E_c pour une variation de W de 0,05.

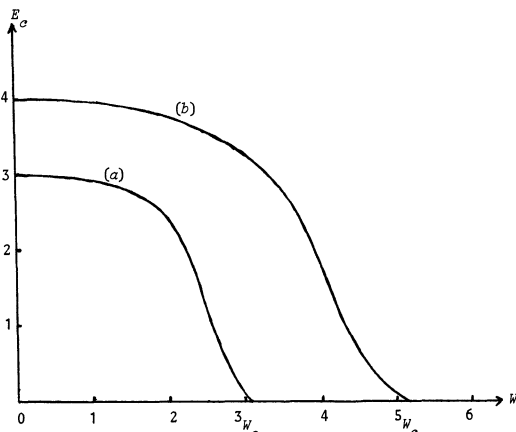


FIG. 2. — Variation du bord de localisation E_c en fonction de W pour $c = 0,1$; (a) pour $K = 2$ et (b) pour $K = 3$.

[Variation of the localization edge E_c as a function of W for $c = 0.1$, a) in the case $K = 2$, b) in the case $K = 3$.]

La valeur W_c qui rend $E_c = 0$ est la valeur où tous les états dans la bande de minorités deviennent localisés; $W_c \simeq 3,1$ pour $K = 2$ et $W_c \simeq 5,3$ pour $K = 3$. Ces résultats pour W_c sont ainsi comparables à ceux obtenus par Economou et Cohen [7] par la méthode de fonction de localisation.

Pour $W = 0$, l'équation (2.7) se réduit à

$$A(y) = \frac{KV}{|a-y|} A\left(\frac{V^2}{a-y}\right).$$

Or cette équation admet pour solution $A(y)$ une fonction δ de Dirac à condition que

$$E = \pm (K+1)V = \pm ZV, \quad [3].$$

On retrouve ce résultat numériquement ici sur les courbes (a) et (b).

Le cas $K = 1$ donne la structure d'une chaîne linéaire pour laquelle tous les états sont localisés. Ceci a été vérifié numériquement de l'équation (2.7).

4. Discussion. — Il faut noter d'abord que les valeurs obtenues pour W_c sont nettement inférieures à celles obtenues en [3]. Il semble que ceci est dû à la valeur plus exacte prise pour $Q(x)$. Car auparavant la somme dans (1.3) a été considérée constante $\frac{K-1}{K}R$. Ainsi donc la différence entre ces résultats et ceux obtenus par la méthode de Fredholm est réduite. Les variations des régions de localisation sont semblables qualitativement à celles obtenues par Licciardello et Economou [8] par la méthode modifiée de fonction de localisation.

En plus les valeurs obtenues pour W_c pour $K = 2$ et 3 sont aussi comparables à celles obtenues en [8] (avec une différence de l'ordre de 20%). La seule différence de base entre la méthode de self-consistence et celle de la fonction de localisation, pour l'alliage binaire, est que cette dernière dépend de la structure du système (Carré, Diamond, Cubique) ce qui n'est pas le cas pour la méthode de self-consistence. Dans l'attente d'une source indépendante de résultats, tout accord entre ces deux méthodes doit être considéré avec méfiance vu que ces deux méthodes sont basées sur des approximations différentes [8].

Bibliographie

- [1] ANDERSON, P. W., *Phys. Rev.* **109** (1958) 1492.
- [2] ABOU-CHACRA, R., ANDERSON, P. W. and THOULESS, D. J., *J. Phys. C* **6** (1973) 1734.
- [3] ABOU-CHACRA, R. and THOULESS, D. J., *J. Phys. C* **7** (1974) 65.
- [4] SOVEN, P., *Phys. Rev.* **156** (1967) 809.
- [5] KIRKPATRICK, S. *et al.*, *Phys. Rev.* **B 1** (1970) 3250.
- [6] RIESZ, F. and NAGY, B., *Functional Analysis* (N. York Ungar) 1956.
- [7] ECONOMOU, E. N. and COHEN, M. H., *Phys. Rev. Lett.* **25** (1970) 1445.
- [8] LICCIARDELLO, D. C. and ECONOMOU, E. N., *Phys. Rev.* **B 11** (1975) 3697.