

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
“ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ”»

Факультет физики

Темкин Владислав Александрович

**О сосуществовании локализованных и делокализованных состояний  
в модели Андерсона с аномально длинными прыжками**

Выпускная квалификационная работа  
по направлению подготовки 03.03.02 Физика  
образовательная программа «Физика»

**Научный руководитель**  
Иоселевич Алексей Соломонович  
*док. физ.-мат. наук*  
*проф. фак. Физики НИУ ВШЭ*

Москва 2023

# Оглавление

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>4</b>
1.1	Модель . . . . .	5
1.2	Низко-энергетические свойства модели . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Оптимальная флуктуация.</b>	<b>9</b>
2.1	Качественное рассмотрение . . . . .	9
2.2	Нелинейное уравнение Шредингера . . . . .	10
2.3	Приближение плоской зоны (Flat Band Approximation, FBA) . . . . .	11
2.4	Одноузельное приближение (Single-Site Approximation, SSA) . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Волновая функция</b>	<b>13</b>
3.1	Отрицательные энергии . . . . .	13
3.2	Положительные энергии . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Численный анализ</b>	<b>16</b>
4.1	Описание алгоритма . . . . .	16
4.2	Результаты . . . . .	16
<b>5</b>	<b>Квазилокализованное состояние</b>	<b>19</b>
5.1	Энергия квазилокализованного состояния . . . . .	19
5.2	Явный вид волновой функции . . . . .	20
5.3	Условие эффективной локализованности . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Собственные энергии</b>	<b>22</b>
6.1	Уравнение Дайсона в SSA . . . . .	22
6.2	Уравнение на уровне энергии . . . . .	23
<b>7</b>	<b>Делокализованное состояние</b>	<b>26</b>
<b>8</b>	<b>Inverse Participation Ratio</b>	<b>29</b>
8.1	Ближний хвост: $L \ll L_c$ . . . . .	29
8.2	Дальний хвост: $L \gg L_c$ . . . . .	30
<b>9</b>	<b>Учет слабых флуктуаций</b>	<b>31</b>
9.1	Одномерный случай . . . . .	32
9.2	Двумерный случай . . . . .	32
<b>10</b>	<b>Заключение</b>	<b>34</b>

---

<b>А</b>	<b>Вычисление функции <math>\Phi(\epsilon, z)</math></b>	<b>35</b>
А.1	$z \ll 1$ . . . . .	35
А.2	$\epsilon \rightarrow \pm \frac{1}{2}$ . . . . .	35
А.3	$\epsilon \ll 1$ . . . . .	35
<b>В</b>	<b>Вычисление функции <math>b(E)</math></b>	<b>37</b>
В.1	Одномерный случай . . . . .	37
В.2	Старшие размерности . . . . .	38

# Аннотация

В модели Андерсона со степенным интегралом перескока  $J(r) \propto -r^{-\beta}$  при условии  $D < \beta < 3D/2$  предполагается сосуществование локализованных и делокализованных состояний вблизи дна зоны проводимости [K.S. Tikhonov, A.S. Ioselevich, M. V. Feigel'man, 2021]. В данной работе мы показываем, что строго говоря, истинно локализованных состояний при  $E > 0$  не существует, но существуют “квазилокализованные”. Мы подробно изучаем детали этих состояний: находим квазилокализованные и делокализованные волновые функции вблизи оптимальной флуктуации потенциала, исследуем поведение Inverse Participation Ratio  $P_q$  в зависимости от энергии  $E$  и размера системы  $L$  и рассматриваем влияние рассеяния на типичных слабых флуктуациях случайного потенциала.

This study aims to investigate the coexistence of localized and delocalized states in the Anderson impurity model with a power-law hopping amplitude  $J \propto -r^{-\beta}$  with  $D < \beta < 3D/2$ , proposed by K.S. Tikhonov, A.S. Ioselevich, M. V. Feigel'man (2021). We demonstrate that, strictly speaking, the genuine localized states do not occur at  $E > 0$ , but, instead of them, quasilocalized ones arise in the vicinity of optimal fluctuations. We provide a derivation of the explicit form for the quasilocalized wave function in the presence of the optimal fluctuation potential, determine the behavior of the Inverse Participation Ratio  $P_q$  as a function of the energy and system size, and consider the effects of scattering at typical weak potential fluctuations.

# Глава 1

## Введение

Развитие экспериментальных методик в последние годы сделало возможным создание систем со степенным спектром  $\varepsilon(k) \propto k^\alpha$ , в которых  $\alpha$  может быть очень тонко подстроено (например, [1] или [2]). Поскольку во всякой реальной системе присутствует беспорядок, то интерес представляет изучение его влияния на системы со степенными прыжками в различных диапазонах  $\alpha$ . Как было показано в [3], поведение систем с  $\alpha < D/2$  отличается принципиальным образом от систем с  $\alpha > D/2$ , поведение которых хорошо изучено (так, например, стандартный трехмерный случай с квадратичным спектром попадает в область  $\alpha > D/2$  и обладает известными свойствами). Примеры систем с различными показателями  $\alpha$  приведены на Рис. 1.1, взятом из [4].

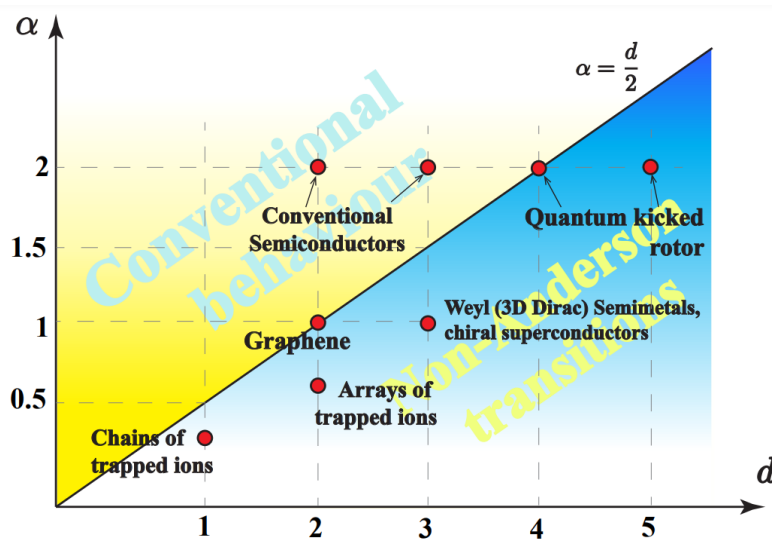


Рис. 1.1: Примеры систем со степенным спектром [4].

В координатном представлении спектр имеет вид  $J(r) \propto r^{-\beta}$ , где  $\beta = \alpha + D$ . В настоящей работе мы рассматриваем случай  $\alpha < D/2$ , что эквивалентно  $D < \beta < 3D/2$ .

Чем примечателен этот режим? В отличие от стандартного случая, где при  $D = 1$  и  $D = 2$  локализация Андерсона происходит при сколь угодно малом беспорядке, при  $\alpha < D/2$  в этих случаях делокализованные состояния вблизи дна зоны проводимости выживают в термодинамическом пределе при недостаточно сильном беспорядке (см. [5] и Глава 9). Помимо этого, согласно [6], вблизи дна зоны проводимости в таких системах могут сосуществовать состояния принципиально разных типов: локализованные и делокализованные. На Рис. 1.2,

взятом из [6], приведено распределение вероятности Inverse Participation Ratio (IPR) вблизи дна зоны, бимодальность которого сигнализирует о сосуществовании различных состояний (определение IPR приведено в Главе 8). Несмотря на то, что эта ситуация не является исключительной (различные виды состояний сосуществуют и в других моделях: см, например, [7] или [8]), нашей главной целью является подробное изучение таких состояний. Таким образом,

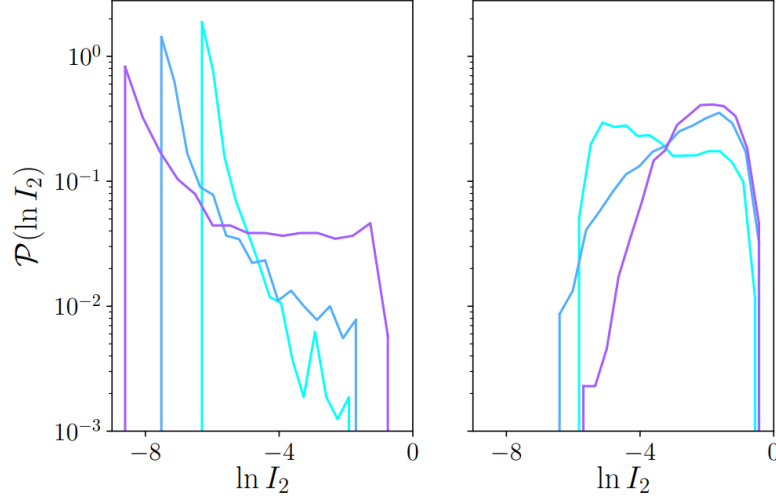


Рис. 1.2: Распределение IPR вблизи дна зоны в одномерной системе при  $\alpha < D/2$  для трех различных размеров системы [6]. Беспорядок на левом графике является субкритическим,  $W < W_c$ , в то время как на правом он превышает критический,  $W > W_c$ .

мы ставим перед собой следующие задачи в этой работе:

- Получить явный вид сосуществующих состояний в модели Андерсона со степенным интегралом перескока  $J(r) \propto -r^{-\beta}$  и показателем  $\beta$  таким, что  $D < \beta < 3D/2$  (Главы 5 и 7).
- Изучить поведение IPR в таких системах (Глава 8).

## 1.1 Модель

В данной работе рассматривается конечная  $D$ -мерная решетка размером  $(2L)^D$  ( $L \gg 1$ ) с периодическими граничными условиями. Гамильтониан такой системы имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{j}\mathbf{j}'} \varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} a_{\mathbf{j}}^\dagger a_{\mathbf{j}'} + \sum_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j}} a_{\mathbf{j}}^\dagger a_{\mathbf{j}}, \quad (1.1)$$

где  $V_{\mathbf{j}}$  – дельта-коррелированный гауссов случайный потенциал:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\{V\} &= \prod_{\mathbf{j}} P(V_{\mathbf{j}}) \propto e^{-\frac{S\{V\}}{W^2}}, \quad S\{V\} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j}}^2, \\ P(V) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}W} \exp\left\{-\frac{V^2}{2W^2}\right\}, \quad \langle V_i \rangle = 0, \quad \langle V_i V_j \rangle = W^2 \delta_{i,j}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

а  $a_{\mathbf{i}}^\dagger$ ,  $a_{\mathbf{i}}$  – операторы рождения и уничтожения частицы, локализованной на узле номер  $\mathbf{i} \equiv (i_1, i_2, \dots, i_D)$ . Интеграл перескока  $\varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} \propto r^{-\beta}$  спадает степенным образом (во всей работе длины измеряются в единицах постоянной решетки). Как было отмечено ранее, в данной работе рассматривается случай  $D < \beta < 3D/2$ .

В импульсном представлении гамильтониан (1.1) имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon(\mathbf{k}_n) a_n^\dagger a_n + \sum_{\mathbf{nn}'} \tilde{V}_{\mathbf{n}'-\mathbf{n}} a_n^\dagger a_{\mathbf{n}'}, \quad (1.3)$$

где импульс  $\mathbf{k}_n$  определен следующим образом:

$$\mathbf{k}_n \equiv \pi \mathbf{n} / L, \quad \mathbf{n} \equiv (n_1, n_2, \dots, n_D), \quad n_i = -L, -L+1, \dots, L, \quad (1.4)$$

а соответствующие собственные волновые функции

$$\phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{j}) = (2L)^{-D/2} \exp(i\pi(\mathbf{j} \cdot \mathbf{n})/L) \quad (1.5)$$

являются плоскими волнами. Фурье-образы операторов  $a_{\mathbf{i}}^\dagger$ ,  $a_{\mathbf{i}}$  является операторами рождения/уничтожения плоских волн и имеют вид:

$$a_{\mathbf{j}} = \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}} \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{j}), \quad a_{\mathbf{j}}^\dagger = \sum_{\mathbf{n}} a_{\mathbf{n}}^\dagger \phi_{\mathbf{n}}^*(\mathbf{j}). \quad (1.6)$$

Фурье-образ случайного потенциала  $\tilde{V}_{\mathbf{q}}$ :

$$\tilde{V}_{\mathbf{q}} = \frac{1}{(2L)^D} \sum_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j}} e^{i\pi \frac{\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}}{L}}. \quad (1.7)$$

Кинетическая энергия в  $k$ -представлении:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{jj}'} \varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} \phi_{\mathbf{n}+\mathbf{k}}(\mathbf{j}) \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{j}') = \varepsilon_0 g(\mathbf{k}). \quad (1.8)$$

Характерная энергия  $\varepsilon_0$  по порядку величины совпадает с шириной зоны. Далее все величины с размерностью энергии измеряются в единицах  $\varepsilon_0$ . В качестве  $g(k)$  в данной работе используется следующая модельная функция:

$$g(\mathbf{k}) = \left| 4 \sum_{\mu=1}^D \sin^2 k_\mu / 2 \right|^{\alpha/2}, \quad (1.9)$$

$$g_{\max} = g(\pi, \pi, \dots, \pi) = (4D)^{\alpha/2}, \quad (1.10)$$

которая на малых импульсах  $k \ll 1$  ведет себя степенным образом

$$g(\mathbf{k}) \approx |k|^\alpha, \quad |k| \equiv \left( \sum_{\mu=1}^D k_\mu^2 \right)^{1/2}. \quad (1.11)$$

Показатель степени в импульсном пространстве,  $\alpha$ , связан с упомянутым ранее показателем в координатном пространстве,  $\beta$ , следующим образом:

$$\alpha = \beta - D, \quad (1.12)$$

что приводит к условию

$$\alpha < D/2. \quad (1.13)$$

Явный вид функции  $g(\mathbf{k})$  (1.10) понадобится нам только при численном счете (см. Глава 4), во всех остальных случаях нам важна только низкэнергетическая асимптотика (1.11).

Ширина зоны выражается через  $\varepsilon_0$  и  $g_{\max}$  следующим образом:

$$W_{\text{band}} = \varepsilon_0 g_{\max}. \quad (1.14)$$

В следующей секции будут подробно изложены свойства идеальной системы при энергиях вблизи дна зоны проводимости.

## 1.2 Низко-энергетические свойства модели

Для низких энергий  $E \ll 1$  спектр  $\varepsilon(\mathbf{k})$  изотропен и соответствующие волновые функции характеризуются угловым моментом. В рассматриваемой задаче релевантными оказываются только сферически-симметричные состояния, поскольку все остальные волновые функции с  $l \neq 0$  зануляются при  $r \rightarrow 0$  и не “чувствуют” присутствия короткодействующего потенциала  $V_0$  (см. Главу 3). Нормированные сферически-симметричные волновые функции:

$$\begin{aligned} \psi_n(r) &= \sqrt{\frac{2k_n^{D-1}}{\sigma_D L}} f(k_n r), \quad \int_0^L \sigma_D r^{D-1} dr |\psi_n(r)|^2 = 1, \\ f(x) &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{J_{D/2-1}(x)}{x^{D/2-1}}, \quad \sigma_D = \frac{D\pi^{D/2}}{\Gamma(D/2 + 1)} \end{aligned} \quad (1.15)$$

где  $r \equiv |\mathbf{r}|$ ,  $k \equiv |\mathbf{k}|$ ,  $k_n = \pi n/L$ ,  $\sigma_D$  – площадь  $D$ -мерной сферы с единичным радиусом, а  $\Gamma(x)$  – гамма-функция Эйлера. На больших расстояниях асимптотика  $f(x)$ :

$$f(x \gg 1) \approx x^{-\frac{D-1}{2}} \cos(x + \varphi_D), \quad \varphi_D = \frac{\pi}{4}(1 - D), \quad (1.16)$$

$$f(0) = \frac{\sqrt{\pi/2}}{2^{D/2-1}\Gamma(D/2)}. \quad (1.17)$$

Для произвольной размерности  $D$  вблизи дна зоны проводимости ( $E \ll 1$ ) плотность состояний:

$$\begin{aligned} \nu_0^{(D)}(E) &= \frac{\sigma_D}{(2\pi)^D} \frac{k^{D-1} dk}{dE} = \frac{\sigma_D/D}{(2\pi)^D} \frac{d(k^D)}{dE} = \\ &= \frac{\sigma_D/D}{(2\pi)^D} \frac{d(E^{D/\alpha})}{dE} = \frac{\sigma_D}{(2\pi)^D \alpha} \frac{K^D}{E}, \end{aligned} \quad (1.18)$$

где был введен характерный волновой вектор

$$K = E^{1/\alpha}. \quad (1.19)$$

В данной работе предполагается, что

$$1/L \ll K \ll 1. \quad (1.20)$$



Интервал между уровнями (level spacing), учитывающий все состояния (как сферически-симметричные, так и все остальные) дается следующим выражением:

$$\delta_D(E) = \left( \nu_0^{(D)}(E) L^D \right)^{-1} = \frac{(2\pi)^D \alpha}{\sigma_D} \frac{E}{(KL)^D}. \quad (1.21)$$

В дальнейшем также будут необходимы плотность сферически-симметричных состояний и их level spacing. В произвольной размерности они совпадают с  $\nu_1(E)$  и  $\delta_1(E)$ :

$$\nu_0^{(1)}(E) \approx \frac{1}{\pi\alpha} \frac{K}{E}, \quad \delta_1(E) = [L\nu_1(E)]^{-1} = \pi\alpha \frac{E}{KL}. \quad (1.22)$$

Стоит отметить, что при малых энергиях  $E \ll 1$  плотность состояний мала, поэтому level spacing, наоборот, велик.

# Глава 2

## Оптимальная флуктуация.

Ввиду случайности потенциала в рассматриваемой системе смысл имеют только усредненные по беспорядку величины. Средние значения даются формулой:

$$\langle \dots \rangle = \int \mathcal{D}V \mathcal{P} \{V\} \dots, \quad (2.1)$$

где  $\mathcal{D}V \equiv \prod_i dV_i$  – мера интегрирования,  $\mathcal{P} \{V\}$  – функция распределения случайного потенциала (1.2), а вместо  $\dots$  должна стоять рассматриваемая величина. Так, для плотности состояний будем иметь:

$$\langle \nu(E) \rangle = \int \mathcal{D}V \mathcal{P} \{V\} \sum_a \delta(E_a \{V\} - E), \quad (2.2)$$

где  $E_a \{V\}$  – собственные энергии в заданном потенциале. Включение беспорядка в системе приводит к появлению состояний в запрещенной зоне, в связи с чем плотность состояний приобретает хвосты вне зоны проводимости. Как мы увидим позже, они спадают экспоненциальным образом, что наталкивает на мысль, что интеграл (2.2) должен вычисляться в седловом приближении. При этом, конфигурация потенциала, реализующая минимум показателя экспоненты в функции распределения, должна поддерживать существование уровня с энергией  $E$ , что накладывает дополнительное ограничение. Такая конфигурация случайного потенциала и называется оптимальной флуктуацией. В секциях 2.1 и 2.2 поэтапно приведен ее анализ.

### 2.1 Качественное рассмотрение

Вспомним, что функция распределения  $P\{V\} \propto e^{-\frac{S\{V\}}{w^2}}$  в соответствии с (1.2). Оптимальная флуктуация случайного потенциала может быть грубо смоделирована как потенциальная яма глубины  $U$  и ширины  $a$ . Тогда необходимо минимизировать действие  $S$  как функцию от двух переменных:

$$S(U, a) \sim U^2 a^d \quad (2.3)$$

Для существования уровня энергии на глубине  $|E|$  яма должна удовлетворять следующим условиям:

1. Яма должна быть глубже уровня энергии  $E$ : ( $U > |E|$ ).

2. Ширина ямы должна быть больше длины волны:  $a > Q^{-1} = U^{-1/\alpha}$ .

Предполагая, что реализуется ситуация, соответствующая самой узкой яме  $a \sim a_{\min} = Q^{-1}$ , необходимо минимизировать следующую функцию:

$$S(U) \sim U^{2-D/\alpha}. \quad (2.4)$$

При  $\alpha > D/2$  (как, например, в привычном случае хвостов Лифшица [9] при  $\alpha = 2$  и  $D < 4$ ) оптимальное действие  $S$  уменьшается с уменьшением  $U$ , поэтому оптимальная флуктуация соответствует минимально возможной глубине ямы  $U_{\min} \sim |E|$ , что приводит к стандартному результату:

$$S_{\text{Lifsh}}^{(\text{opt})} \propto |E_0|^{2-D/\alpha}. \quad (2.5)$$

В рассматриваемом здесь случае  $\alpha < D/2$  и действие  $S$  уменьшается при увеличении  $U$ , из-за чего минимум  $S$  формально соответствует максимально глубокой флуктуации. В континуальном приближении такая оптимальная флуктуация была бы бесконечно глубокой и бесконечно узкой, т.е. давалась бы дельта-функцией. В реальности, однако, флуктуация случайного потенциала должна содержать как минимум один узел решетки, поэтому минимум действия соответствует  $a \sim 1$ ,  $U \sim \max\{|E|, t\}$ . В результате, получается следующая оценка:

$$S_{\text{nonLif}}^{(\text{opt})} \sim 1 \quad (2.6)$$

## 2.2 Нелинейное уравнение Шредингера

Следуя стандартной процедуре поиска оптимальной флуктуации потенциала  $V_{\mathbf{j}}$  и соответствующей локализованной волновой функции  $\Psi_{\mathbf{n}}$ , необходимо минимизировать следующее действие:

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\{\Psi, V\}, \lambda, \eta) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j}}^2 - \lambda \left\{ \sum_{\mathbf{j}\mathbf{j}'} \Psi_{\mathbf{j}'}^* \varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} \Psi_{\mathbf{j}} + \sum_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{j}} |\Psi_{\mathbf{j}}|^2 - E_0 \right\} - \\ - \eta \left\{ \sum_{\mathbf{j}} |\Psi_{\mathbf{j}}|^2 - 1 \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

по двум функциям  $\Psi_{\mathbf{j}}$ ,  $V_{\mathbf{j}}$  и двум параметрам  $\lambda$  и  $\eta$ . Второе слагаемое в правой части (2.7) соответствует условию существования состояния с энергией  $E_0$  в потенциальной яме, а третье – условию нормировки этого состояния. Вариация (2.7) по  $V_{\mathbf{j}}$  позволяет выразить  $V_{\mathbf{j}}$  через  $\Psi_{\mathbf{j}}$  и  $\lambda$ :

$$V_{\mathbf{j}} = \lambda |\Psi_{\mathbf{j}}|^2, \quad (2.8)$$

в результате чего получается следующий вид действия:

$$-\frac{1}{\lambda} \tilde{S}(\{\Psi\}, \lambda) = \sum_{\mathbf{j}\mathbf{j}'} \Psi_{\mathbf{j}'}^* \varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} \Psi_{\mathbf{j}} + \frac{\lambda}{2} \sum_{\mathbf{j}} |\Psi_{\mathbf{j}}|^4 - E_0 \sum_{\mathbf{j}} |\Psi_{\mathbf{j}}|^2 \quad (2.9)$$

Его необходимо минимизировать по  $\Psi_{\mathbf{j}}$  с условием нормировки

$$\sum_{\mathbf{j}} |\Psi_{\mathbf{j}}|^2 = 1. \quad (2.10)$$

В итоге, после простых выкладок получается дискретное нелинейное уравнение Шредингера (НУШ):

$$\sum_{j'} \varepsilon_{j-j'} \Psi_{j'} + \{\lambda |\Psi_j|^2 - E_0\} \Psi_j = 0. \quad (2.11)$$

Волновая функция  $\Psi_j$  должна быть локализована, то есть она должна затухать при больших  $j$ . При этом необходимо, чтобы удовлетворялось условие нормировки (2.10). Для его выполнения остается один свободный параметр –  $\lambda$ . Явный вид волновой функции  $\Psi_j^{(\text{opt})}$  и оптимального параметра  $\lambda_{\text{opt}}$  могут быть найдены только с помощью численного решения дискретного НУШа (2.11) (см. Глава 4). Итоговое выражение на оптимальное действие (1.2) имеет следующий вид:

$$\frac{S_{\text{opt}}}{W^2} = \frac{\sum_j \left( V_j^{(\text{opt})} \right)^2}{2W^2} = \frac{\lambda_{\text{opt}}^2}{2W^2} \sum_j \left| \Psi_j^{(\text{opt})} \right|^4 \quad (2.12)$$

В этой работе рассматривается действие  $S_{\text{opt}}(E_0)$  для малых энергий  $|E_0| \ll 1$ , поэтому можно разложить  $S_{\text{opt}}(E_0)$  по  $E_0$  до первого порядка:

$$S_{\text{opt}}(E_0) \approx S_{\text{opt}}(0) + \lambda_{\text{opt}}(0) E_0. \quad (2.13)$$

Константы  $S_{\text{opt}}(0)$  и  $\lambda_{\text{opt}}(0)$  – порядка единицы, они зависят от размерности  $D$ , показателя  $\alpha$  и типа решетки.

Тем не менее, в некоторых случаях удается построить очень хорошее приближение оптимальной флуктуации. Этому посвящены секции 2.3, 2.4 и Глава 4.

## 2.3 Приближение плоской зоны (Flat Band Approximation, FBA)

При очень маленьких  $\alpha \ll 1$  электроны практически не обладают дисперсией в большей части зоны Бриллюэна, т.е.

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \approx W_{\text{band}}, \quad E_{\text{loc}}^{(0)} \approx W_{\text{band}}, \quad (2.14)$$

и наличие дисперсии заметно только в экспоненциально узкой области  $k \sim e^{-1/\alpha}$ . В ведущем приближении оптимальный потенциал

$$V_j^{(\text{opt})} = (-W_{\text{band}} + E_0) \delta_{j,0} \quad (2.15)$$

и соответствующая волновая функция

$$\Psi_j^{(\text{opt})} = \delta_{j,0}. \quad (2.16)$$

идеально локализованы на одном узле решетки. Оптимальное действие тогда дается простой формулой:

$$S^{(\text{opt})}(E_0) = \frac{1}{2} (W_{\text{band}} - E_0)^2. \quad (2.17)$$

## 2.4 Одноузельное приближение (Single-Site Approximation, SSA)

При увеличении  $\alpha$  приближение FBA перестает работать: волновая функция уже локализована не на одном узле, поэтому формула (2.16) не является корректной. Тем не менее, как будет показано в Главе 4 при помощи численного анализа, оптимальный потенциал  $V_j^{(\text{opt})}$  остается короткодействующим и при  $\alpha$ , отличных от нуля: потенциал локализован на одном узле с относительной погрешностью менее 1%! Ввиду этого обстоятельства, интерес представляет одноузельное приближение (SSA) оптимальной флуктуации, согласно которому

$$V_j^{(\text{opt})} = V_0(E_0)\delta_{j,0}, \quad S^{(\text{opt})}(E_0) = V_0^2(E_0)/2, \quad (2.18)$$

где зависимость  $V_0(E_0)$  еще должна быть найдена. Стоит подчеркнуть, что формула (2.18), вообще говоря, неверна. В частности, она не находится в соответствии с требованием (2.8), которое связывает оптимальный потенциал с локализованной волновой функцией. Тем не менее, как будет показано ниже (см. Глава 4), приближение SSA работает чрезвычайно хорошо до тех пор, пока рассматриваются “интегральные” характеристики, определяемые “ядром” флуктуации. Вдобавок к этому, одноузельное приближение позволяет решить возникающую квантово-механическую задачу точно. В частности, в [6] было показано, что в приближении SSA

$$V_0(E_0) = \left\{ \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{E_0 - \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right\}^{-1}. \quad (2.19)$$

Мы обратимся к применениям SSA несколько позже (см. Глава 6), но до того приведем результаты, верные для всякого короткодействующего потенциала (не обязательно одноузельного).

# Глава 3

## Волновая функция

Предположим, что оптимальная флуктуация потенциала  $V_{\mathbf{j}}^{(\text{opt})}$  найдена. Для определения всех (в том числе возбужденных) состояний  $\psi_{\mathbf{j}}^{(m)}$ , соответствующих энергиям  $E_m$ , необходимо решить уравнение Шредингера:

$$\sum_{\mathbf{j}'} \varepsilon_{\mathbf{j}-\mathbf{j}'} \psi_{\mathbf{j}'}^{(m)} + \{V_{\mathbf{j}}^{(\text{opt})} - E_m\} \psi_{\mathbf{j}}^{(m)} = 0. \quad (3.1)$$

Наложение периодических граничных условий на волновую функцию приводит к квантованию уровней энергии  $E_m$ , которым соответствуют решения  $\psi_m(\mathbf{j})$ . Очевидно, что  $\Psi_{\mathbf{j}}^{(\text{opt})}$  будет одним из этих состояний.

Формальное решение (3.1) может быть записано следующим образом:

$$\psi_{\mathbf{j}} = \sum_{\mathbf{j}'} g_E(\mathbf{j} - \mathbf{j}') \psi_{\mathbf{j}'}^{(\text{opt})}, \quad (3.2)$$

где

$$g_E(\mathbf{j}, \mathbf{j}') = g_E(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\exp[i(\mathbf{k}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r})]}{E - \varepsilon_{\mathbf{n}}}, \quad \mathbf{r} \equiv \mathbf{j} - \mathbf{j}', \quad \varepsilon_{\mathbf{n}} \equiv \varepsilon(\mathbf{k}) \quad (3.3)$$

функция Грина свободной частицы.

Запись волновой функции  $\psi_n(\mathbf{j})$  через функцию Грина (6.2), использующей базис (1.5), автоматически закладывает выполнение граничных условий. Сумма по  $\mathbf{j}'$  в (3.2) сходится на малых  $|\mathbf{j}'| \sim 1$ , потому что предполагается, что  $V_{\mathbf{j}'}^{(\text{opt})}$  сильно локализован: потенциал быстро убывает с ростом  $|\mathbf{j}'|$ . Для больших  $\mathbf{j} \gg 1$  получаем

$$\psi_{\mathbf{j}} = A(E) g_E(\mathbf{j}) \quad (3.4)$$

где  $A(E)$  – коэффициент, не зависящий от  $\mathbf{j}$ .

Таким образом, асимптотика функции Грина ощущает присутствие потенциала только через энергию  $E$ , а вся задача свелась к нахождению функции Грина  $g_E(\mathbf{j})$ .

### 3.1 Отрицательные энергии

При отрицательных значениях энергии  $E$  ряд (3.3) набирается на импульсах во всей зоне Бриллюэна. В соответствии с этим его можно заменить на интеграл:

$$g_{E<0}(\mathbf{r}) \approx \int_{\text{BZ}} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (3.5)$$

Поведение этого интеграла может быть легко исследовано. На самых маленьких расстояниях  $|\mathbf{r}| \lesssim r_0 \sim 1$  основной вклад в (3.13) приходит с  $k \sim \pi$ , поэтому в знаменателе может быть отброшено слагаемое  $E$  по сравнению с  $\varepsilon(\mathbf{k})$ . В итоге, на этих расстояниях получается  $g_E \sim 1$ . Более того, пренебречь энергией  $E$  можно вплоть до расстояний  $r \lesssim r_1$ , где

$$r_1(E) \sim 1/K \sim E^{-1/\alpha} \gg 1. \quad (3.6)$$

В этой области ( $r_0 \ll r \ll r_1$ ) получается:

$$g_{E<0}(\mathbf{r}) \approx - \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}}{\varepsilon(\mathbf{k})} \approx - \frac{1}{r^{D-\alpha}} \int \frac{d^D \mathbf{q}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{m})}}{\varepsilon(q)} \propto \frac{1}{r^{D-\alpha}}, \quad (3.7)$$

где были введены вектора  $\mathbf{m} \equiv \mathbf{r}/r$  и  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}r$ . Главный вклад в интеграл (3.7) приходит с  $q \sim 1$  или с маленьких  $k \sim 1/r$ .

При  $r \gg r_1(E)$  можно разложить знаменатель по малому  $\varepsilon(k)$ . Получаем:

$$g_{E<0}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{E^2} \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} \varepsilon(k) = \frac{1}{E^2 r^{D+\alpha}} \int \frac{d^D \mathbf{q}}{(2\pi)^D} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{m})} \varepsilon(q) \propto \frac{1}{r^{D+\alpha}}, \quad (3.8)$$

Легко заметить, что результаты (3.7) и (3.8) сшиваются на расстояниях  $r \sim r_1$ .

В итоге, получаем следующий вид функции Грина на отрицательных энергиях:

$$g_{E<0}(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} 1, & r \lesssim r_0, \\ r^{\alpha-D}, & r_0 \ll r \ll r_1, \\ r_1^{2\alpha}(E)r^{-\alpha-D}, & r \gg r_1, \end{cases} \quad (3.9)$$

а волновая функция:

$$\psi_{\text{opt},E<0}^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} g_{E<0}(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

где  $c \sim 1$  – нормировочный множитель. Нормировка волновой функции набирается на расстояниях  $r \sim 1$ , поэтому  $c$  практически не зависит от  $E$ . Для ее вычисления необходимо использовать точное численное решение, так как асимптотическая формула (3.9) верна только на больших расстояниях. Ясно, что волновая функция (3.10) является локализованной, причем длина ее локализации оказывается  $\sim 1$ , поскольку  $\alpha < D/2$ .

Гораздо более сложной ситуация оказывается при энергиях  $0 < E < \varepsilon_{\text{max}}$ , о чем и пойдет речь в разделе 3.2.

## 3.2 Положительные энергии

Большая часть состояний с положительной энергией  $\psi_{\mathbf{j}}^{(n)}$  слабо подвержены влиянию оптимальной флуктуации, поэтому соответствующие энергии и волновые функции описываются выражениями (1.5) и (1.8):

$$\psi_{\mathbf{j}}^{(n)} \approx \phi_{\mathbf{n}}(\mathbf{j}), \quad E_n \approx \varepsilon_{\mathbf{n}}, \quad (3.11)$$

Такие состояния полностью делокализованы. Тем не менее, существует подмножество состояний, которые “ощущают” присутствие потенциала (2.8), – состояния, симметричные относительно вращений вокруг оптимальной флуктуации. Стоит отметить, что level-spacing для

таких состояний:  $\delta_1(E) \propto L^{-1}$  (см. формулу (1.22)), что при  $D > 1$  параметрически превосходит общий level-spacing  $\delta_D$ . Для таких состояний удобно разделить  $g_E(\mathbf{r})$  на две части:

$$g_E(\mathbf{r}) = g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) + g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}), \quad (3.12)$$

Сглаженная часть функции Грина

$$g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) = \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (3.13)$$

соответствует (квази)-локализованной части функции Грина, поскольку интеграл в смысле главного значения (3.13) сходится на импульсах  $\mathbf{k}$ , равномерно распределенных по всей зоне Бриллюэна. С другой стороны, “сингулярный” вклад

$$g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\exp[i(\mathbf{k}_{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{r})]}{E - \varepsilon_{\mathbf{n}}} - \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (3.14)$$

описывает делокализованную часть функции Грина, потому что доминирующий вклад в нее вносят слагаемые с  $|\mathbf{k}|$ , близкими к  $K$ . Таким образом, на больших  $|\mathbf{r}|$  волновые функции  $\psi_E(\mathbf{r}) = A g_E(\mathbf{r})$  для произвольных  $E$  являются смесью (квази)-локализованных и делокализованных состояний :

$$\Psi_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) = A g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}), \quad \psi_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) = A g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) \quad (3.15)$$

В Главе 5 будет подробно изучена (квази)-локализованная часть волновой функции и обсуждены условия, при которых она может считаться локализованной, а в Главе 7 будет обсуждена делокализованная добавка к ней.



# Глава 4

## Численный анализ

### 4.1 Описание алгоритма

Так как интерес для нас представляет не только нахождение точного решения уравнения (2.11), но и определение точности одноузельного приближения (2.18), то была построена следующая итерационная процедура:

- На шаге номер  $P$  полагалось, что

$$V_{|\mathbf{j}|\leq P}^{(\text{opt})} = \lambda|\psi_{\mathbf{j}}|^2, \quad V_{|\mathbf{j}|>P}^{(\text{opt})} = 0. \quad (4.1)$$

Вычисление начинается с  $P = 0$ , то есть одноузельного приближения.

- С помощью (4.1) и (3.2) находилась волновая функция во всей системе.
- Равенство (3.2) использовалось в качестве системы уравнений на  $\psi_{|\mathbf{j}|\leq P}$ . Эта система дополнялась условием нормировки  $\sum_{\mathbf{j}} |\psi_{\mathbf{j}}|^2 = 1$ .
- С помощью найденного решения на каждом шагу вычислялось оптимальное действие, которое сравнивалось с полученным на предыдущем шаге.

Отдельный интерес представляет вычисление  $g_E(\mathbf{r})$ : так как главный вклад в оптимальный потенциал на маленьких расстояниях дается сглаженной частью функции Грина, то вместо точного численного взятия ряда численно вычислялся интеграл  $g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r})$ . Это позволяет избежать от расходимостей при  $E$  близких к  $\varepsilon_n$ , а также демонстрирует поведение оптимальной флуктуации в бесконечной системе. Влияние конечности системы на нормировку волновой функции подавлено путем выбора достаточно больших размеров (при дальнейшем увеличении  $L$  поправки становятся пренебрежимо малыми).

Помимо этого, для вычисления относительной поправки к действию,  $\varkappa(P) = [S^{(P)} - S^{(\infty)}] / S^{(\infty)}$ , действие  $S^{(P)}$  было экстраполировано на  $P = \infty$  с помощью степенного закона (показатель степени выступал в роли подгоночного параметра).

### 4.2 Результаты

Численное изучение оптимальной флуктуации подтверждает ее локализованный характер: при малых  $|\mathbf{j}|$  потенциал  $V_{\mathbf{j}}^{(\text{opt})}$  быстро убывает с ростом  $|\mathbf{j}|$ . Например, в случае  $D = 1$ ,

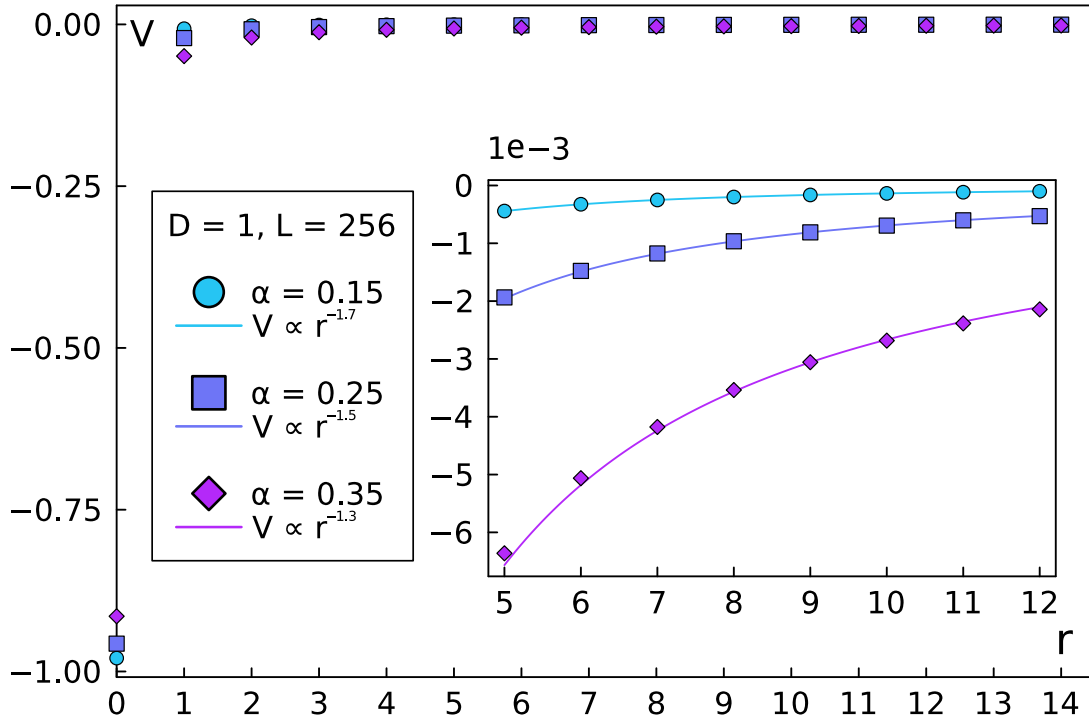
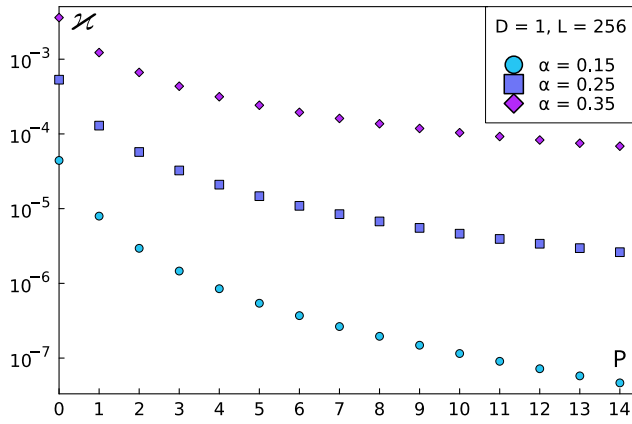


Рис. 4.1: Профиль оптимальной флуктуации потенциала в пространстве с размерностью  $D = 1$ . На первой координационной сфере, как видно, он убывает уже на 2 порядка, в то время как далее убывание становится гораздо более медленным.

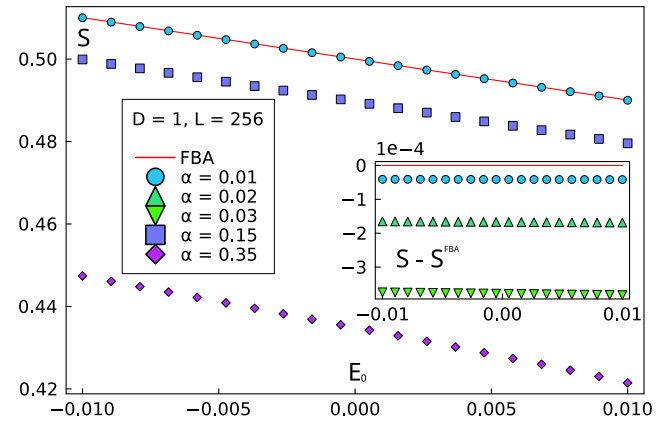
$V_{\pm 1}^{(\text{opt})}/V_0^{(\text{opt})}$  изменяется от 0.01 при  $\alpha = 0.15$  до 0.04 при  $\alpha = 0.35$  (см. Рис.4.1). В то же время убывание оптимальной флуктуации  $V_j^{(\text{opt})}$  на больших расстояниях  $|j| \gg 1$  становится гораздо медленнее и хорошо описывается степенным законом:

$$V_r^{(\text{opt})} \propto |\Psi_r^{(\text{opt})}|^2 \propto |r|^{2\alpha-2D}. \quad (4.2)$$

Показатель степени здесь соответствует асимптотике  $1 \ll |r| \ll E^{-1/\alpha}$  интеграла (3.13), что подтверждает верность численной процедуры. На Рис. 4.2a и Рис. 4.2b приведены относительная погрешность  $P$ -ого приближения и зависимость оптимального действия от энергии в одномерии. В старших размерностях относительная погрешность  $\varkappa$  ведет себя качественно так же, как и в одномерии, быстро убывая при увеличении  $P$ . На Рис. 4.3a и Рис. 4.3b приведены зависимости оптимального действия при  $D = 2$  и  $D = 3$ .

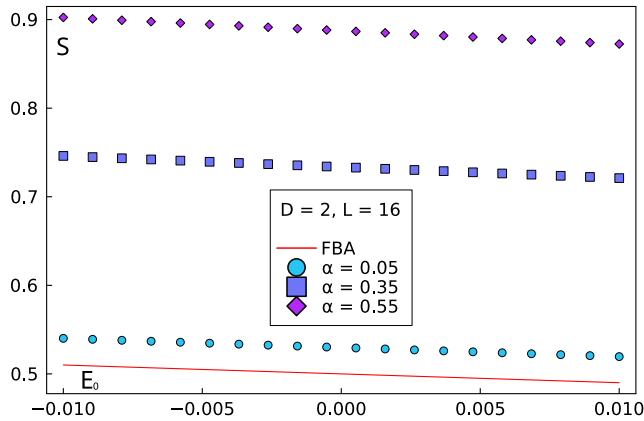


(a) Относительная точность  $\varkappa(P) = [S^{(P)} - S^{(\infty)}]/S^{(\infty)}$  “урезанных” моделей с  $P$  координатными сферами потенциала.

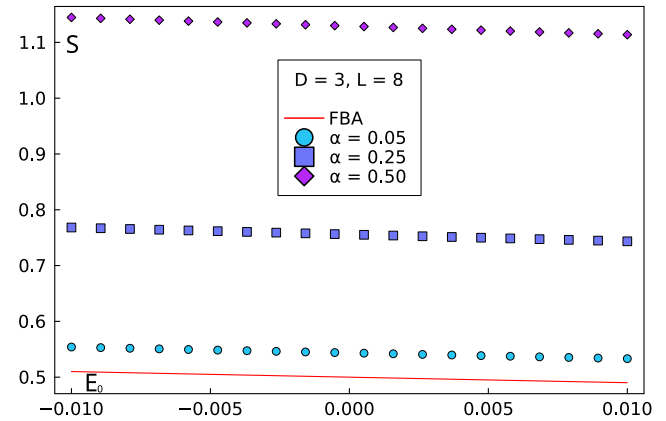


(b) Зависимость  $S^{(\text{opt})}(E_0)$  при  $D = 1$ , полученная численно. Сплошная красная линия соответствует результату приближения FBA.

Рис. 4.2: Численный анализ оптимальной флуктуации в одномерном пространстве.



(a) То же самое, что на Рис.4.2b, но при  $D = 2$ .



(b) То же самое, что на Рис.4.2b, но при  $D = 3$ .

Рис. 4.3: Численный анализ оптимальной флуктуации в двух- и трехмерии.

# Глава 5

## Квазилокализованное состояние

### 5.1 Энергия квазилокализованного состояния

Рассмотрим теперь состояния с положительными энергиями более подробно. Вспомним, что в этом случае функция Грина  $g_E(\mathbf{r})$  разбивается на 2 части: сглаженную и сингулярную. При каких энергиях сингулярная часть подавляется? Чтобы ответить на этот вопрос, удобно ввести следующие величины:

$$\epsilon(E) \equiv \frac{E - E_{\text{mid}}}{\delta_1(E)}, \quad E_{\text{mid}}(E) \equiv \frac{\epsilon_{\text{right}} + \epsilon_{\text{left}}}{2}, \quad (5.1)$$

где  $\epsilon_{\text{left}}/\epsilon_{\text{right}}$  – ближайший к  $E$  слева/справа уровень энергии, соответствующий сферически симметричному состоянию (см. Рис. 5.1). Локальный level-spacing:  $\delta_1(E) = \epsilon_{\text{right}} - \epsilon_{\text{left}}$ .

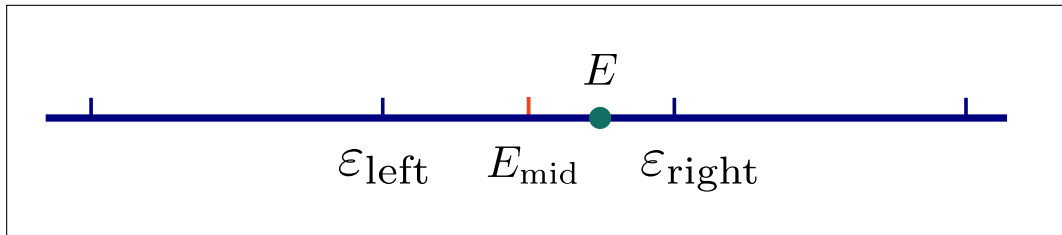


Рис. 5.1: К определению величин  $\epsilon_{\text{right}}$ ,  $\epsilon_{\text{left}}$ , и  $E_{\text{mid}}$ .

Ясно, что при  $Kr \ll 1$  слагаемые в (3.3) с  $E < \epsilon_n$  и  $E > \epsilon_n$  сокращаются ровно так же, как это происходит при взятии интеграла в смысле главного значения. Таким образом, мы приходим к тому, что

$$g_{E=E_{\text{mid}}}(|\mathbf{r}| \ll r_1) \approx g_E^{(\text{loc})}(|\mathbf{r}| \ll r_1) = \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}}{E - \epsilon(\mathbf{k})}, \quad (5.2)$$

где по-прежнему  $r_1 \sim K^{-1} = E^{-1/\alpha}$ .

## 5.2 ЯВНЫЙ ВИД ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Поведение сглаженной части волновой функции в области  $r \ll r_1$  дается тем же выражением, что и для состояний в запрещенной зоне:

$$\Psi_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} 1, & r \lesssim r_0, \\ r^{\alpha-D}, & r_0 \ll r \ll r_1, \end{cases} \quad (5.3)$$

а условие квазилокализации имеет вид:

$$E = E_{\text{mid}} \quad \text{или} \quad \epsilon = 0. \quad (5.4)$$

Для того, чтобы утверждать, что полученное нами состояние является истинно локализованным, а не квазилокализованным, необходимо, чтобы его хвосты при  $r \gg r_1$  спадали достаточно быстро и нормировка сходилась на нижнем пределе. Однако, как мы сейчас убедимся, это не так. Рассмотрим сумму (3.3) при  $E = E_{\text{mid}}$ :

$$g_E(|\mathbf{r}| \gg r_1) \propto \sum_{\mathbf{n}} \frac{e^{i\mathbf{k}_n \mathbf{r}}}{E_{\text{mid}} - \epsilon_{\mathbf{k}_n}}. \quad (5.5)$$

Основной вклад в этот ряд вносят слагаемые с  $|\mathbf{k}_n| \approx K$ , поэтому будем вычислять его, разложив  $\epsilon_{\mathbf{k}_n}$  в окрестности  $E$ . Для удобства введем целое число  $l$  следующим образом:

$$n = n_{\text{left}}(E_{\text{mid}}) + l, \quad k_n = K(E_{\text{mid}}) + \frac{\pi}{L}(l - 1/2), \quad (5.6)$$

$$\epsilon_n = E_{\text{mid}} + (l - 1/2)\delta_1(E). \quad (5.7)$$

Поскольку спектр изотропен, удобно сначала произвести суммирование по “угловой” переменной. Тогда в числителе (5.5) вместо плоских волн будут стоять сферические. Нам потребуются лишь их асимптотики для вычисления этого ряда:

$$f_n(r) \approx x^{-(D-1)/2} \cos(x + \varphi_D), \quad x \equiv (K(E_m)r - (\pi r/L)[\epsilon - (l - 1/2)]) \gg 1. \quad (5.8)$$

В итоге, выражение (5.5) переписывается в следующем виде (с точностью до множителей, не зависящих от  $r$ ):

$$g_E(|\mathbf{r}| \gg r_1) \propto \text{Re} \left[ -e^{iKr - i\frac{\pi r}{2L}} (Kr)^{-(D-1)/2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\frac{\pi r}{L}l}}{l - \frac{1}{2}} \right], \quad (5.9)$$

где пределы суммирования были распространены на  $\pm\infty$ , поскольку  $L \gg 1$  и ряд сходится на малых  $l$ . Ряд в (5.9) легко вычисляется (см. [10]):

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\pi lz}}{l - 1/2} = -i\pi e^{i\frac{\pi}{2}z}, \quad (5.10)$$

что приводит нас к итоговому выражению для волновой функции при  $E = E_{\text{mid}}$ :

$$\Psi_E^{(\text{loc})}(\mathbf{r}) \sim \begin{cases} 1, & r \lesssim r_0, \\ r^{\alpha-D}, & r_0 \ll r \ll r_1, \\ r_1^{\alpha-D} \frac{\sin(Kr + \varphi_D)}{(Kr)^{\frac{D-1}{2}}}, & r \gg r_1. \end{cases} \quad (5.11)$$

Теперь становится ясно, почему ранее мы называли это состояние квазилокализованным: наличие осциллирующих хвостов (даже при  $\epsilon = 0$ ) препятствует истинной локализации.

### 5.3 Условие эффективной локализованности

При рассмотрении конечных систем возможны ситуации, в которых квазилокализованное состояние является эффективно локализованным. Действительно, нормировка дается следующим выражением:

$$\begin{aligned} \int d^D \mathbf{r} |\Psi^{(\text{loc})}(\mathbf{r})|^2 &\sim \left( 1 + r_1^{2(\alpha-D)} K^{-D} \int_1^{Kr} dy \sin^2 y \right) \sim \\ &\sim \left( 1 + E^{-\frac{2}{\alpha}(\alpha-D) - \frac{D}{\alpha} + \frac{1}{\alpha} L} \right) \sim \left( 1 + E^{-2 + \frac{D+1}{\alpha} L} \right). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Вклад от делокализованного хвоста в нормировку пропадает при достаточно малых энергиях. Определим величину  $L_c$  следующим образом:

$$L_c \equiv E^{-\frac{D+1-2\alpha}{\alpha}}. \quad (5.13)$$

Тогда вклад от хвостов пренебрежимо мал при

$$L \ll L_c. \quad (5.14)$$

При этом необходимо выполнение условия  $KL \gg 1$  (1.20), что равносильно

$$L^{-\alpha} \ll E. \quad (5.15)$$

Одновременное выполнение условий (5.14) и (5.15) возможно только при  $\frac{\alpha}{D+1-2\alpha} < \alpha$ , что эквивалентно неравенству  $\alpha < D/2$ , которое предполагается выполненным по условию.

# Глава 6

## Собственные энергии

До этого момента у нас не было необходимости в уточнении деталей оптимальной флуктуации. Однако, для получения окончательных ответов нам необходимо вывести явное соотношение между энергией  $E$  и глубиной оптимальной флуктуации. В общем виде для произвольной формы флуктуации вывести такое соотношение не удастся. Поэтому в данной главе мы используем одноузельное приближение SSA, что позволит найти весь спектр в присутствии оптимального потенциала.

### 6.1 Уравнение Дайсона в SSA

В одноузельном приближении уравнение Дайсона на точную функцию Грина  $G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  имеет вид:

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + V g_E(\mathbf{r}, \mathbf{0}) G_E(\mathbf{0}, \mathbf{r}'), \quad (6.1)$$

где  $g_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  по-прежнему является функцией Грина свободной системы (т.е. при  $V = 0$ ):

$$g_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{n}} \frac{\exp(i(\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')))}{E - \varepsilon_{\mathbf{n}}}. \quad (6.2)$$

Тогда для  $G_E(\mathbf{0}, \mathbf{0})$  получаем

$$G_E(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = g_E(\mathbf{0}, \mathbf{0}) + V g_E(\mathbf{0}, \mathbf{0}) G_E(\mathbf{0}, \mathbf{0}), \quad (6.3)$$

следовательно,

$$G_E^{-1}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = g_E^{-1}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) - V, \quad G_E(\mathbf{r}, \mathbf{0}) = \frac{g_E(\mathbf{r}, \mathbf{0})}{1 - g_E(\mathbf{0}, \mathbf{0})V} \quad (6.4)$$

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = g_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{V g_E(\mathbf{r}, \mathbf{0}) g_E(\mathbf{0}, \mathbf{r}')}{1 - g_E(\mathbf{0}, \mathbf{0})V} = g_E(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \mathbf{0}) + \frac{V g_E(\mathbf{r}, \mathbf{0}) g_E(\mathbf{0}, \mathbf{r}')}{1 - g_E(\mathbf{0}, \mathbf{0})V}. \quad (6.5)$$

Таким образом, собственные энергии  $E_n$  системы с одноузельной оптимальной флуктуацией являются корнями уравнения

$$g_E^{-1}(\mathbf{0}, \mathbf{0}) - V = 0. \quad (6.6)$$

Ясно, что аналогичным образом можно найти и волновые функции, но так как мы сделали это ранее, то не будем останавливаться здесь на этом (преимущество одноузельного приближения при вычислении волновой функции заключается в том, что явно удастся выразить нормировочный коэффициент).

## 6.2 Уравнение на уровни энергии

Как и в предыдущих главах, функцию Грина удобно разделить на 2 части:

$$g_E(\mathbf{0}) = g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{0}) + g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{0}), \quad g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{0}) = \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (6.7)$$

Из предыдущей главы мы знаем, что в случае  $E = E_{\text{mid}}$  дискретная часть зануляется:  $g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{0}) = 0$ . В соответствии с этим можем записать:

$$g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{0}) = \int_{BZ} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k})} \approx \sum_n \frac{|\psi_n(0)|^2}{E_{\text{mid}}(E) - \varepsilon_n}. \quad (6.8)$$

Для того, чтобы найти сингулярную часть функции Грина,  $g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{0}) = g_E(\mathbf{0}) - g_E^{(\text{loc})}(\mathbf{0})$ , снова введем целое число  $l$  такое, что:

$$n = n_{\text{left}}(E) + l, \quad \varepsilon_n = E_{\text{mid}}(E) + (l - 1/2)\delta_1 \quad (6.9)$$

$$E - \varepsilon_n = (E - E_{\text{mid}}(E)) - (l - 1/2)\delta_1, \quad E_{\text{mid}}(E) - \varepsilon_n = -(l - 1/2)\delta_1, \quad (6.10)$$

$$\delta_1 \equiv \delta_1(E). \quad (6.11)$$

Тогда можем записать:

$$\begin{aligned} g_E^{(\text{deloc})}(0) &\approx \frac{2K^{D-1} f(0)^2}{\sigma_D L} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{[E - E_{\text{mid}}(E)] - \delta_1(l - 1/2)} - \frac{1}{-\delta_1(l - 1/2)} \right\} = \\ &= -\frac{2K^{D-1} f(0)^2}{\sigma_D L} \frac{1}{\delta_1(E)} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon}{[(1/2 + l) - \epsilon][1/2 + l]} = \\ &= -\frac{2K^{D-1} f(0)^2}{\sigma_D} \nu_1(E) \pi \tan(\pi\epsilon) = -\pi \nu_D(E) \tan(\pi\epsilon) \end{aligned} \quad (6.12)$$

В итоге, мы приходим к соотношению:

$$g_E^{(\text{deloc})}(0) = -\pi \nu_D(E) \tan(\pi\epsilon), \quad (6.13)$$

Интересным оказывается то, что в итоговый результат входит полная  $D$ -мерная плотность состояний  $\nu_D(E)$ .

Уравнение на собственные энергии принимает вид:

$$1/V = F_0(E) - \pi \nu_D(E) \tan(\pi\epsilon) \quad (6.14)$$

или

$$\epsilon = \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{F_0(E) - 1/V}{\pi \nu_D(E)} \right), \quad (6.15)$$

где  $F_0(E) = g_E^{(\text{loc})}(0)$ . Обозначим решение уравнения

$$F_0(E) - 1/V = 0 \quad (6.16)$$



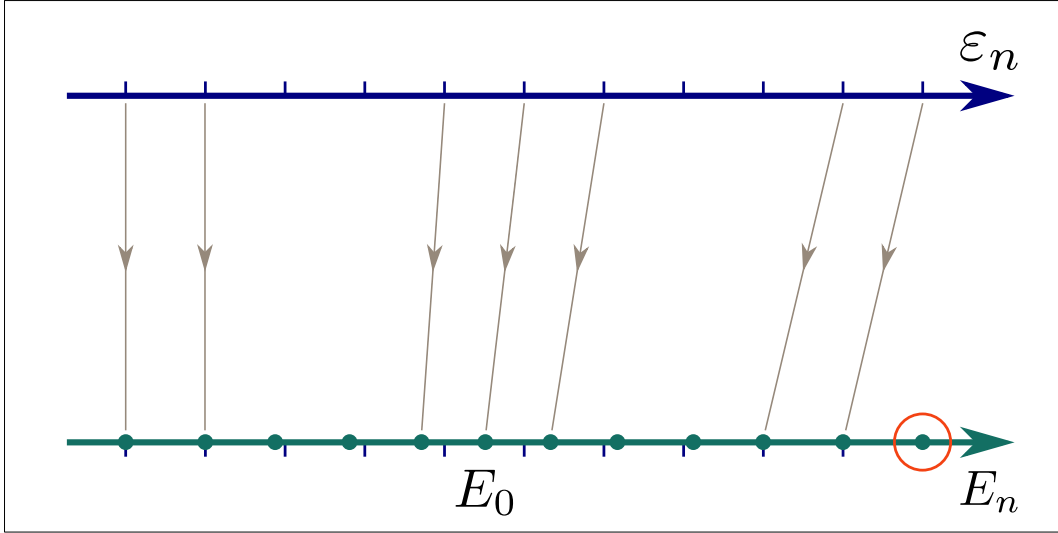


Рис. 6.1: К сдвигу уровней энергии: верхний спектр соответствует невозмущенной задаче с  $V = 0$ , нижний – задаче с введенной одноузельной оптимальной флуктуацией. Из-за смещения всех уровней в спектре возникает лишний уровень, обведенный оранжевым кольцом.

как  $E = E_0(V)$ . Тогда для  $|E - E_0(V)| \ll 1$  можно записать

$$\epsilon = \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{E - E_0(V)}{\pi \nu_D(E)} \frac{dF_0}{dE} \Big|_{E=E_0(V)} \right) = \frac{1}{\pi} \arctan \left( \frac{E - E_0(V)}{\Delta(E)} \right), \quad (6.17)$$

где

$$\Delta(E_0) = \frac{\pi \nu_D(E_0)}{b(E_0)} \sim \frac{K^D}{E} \ll E, \quad (\text{т.к. } \alpha < D/2), \quad (6.18)$$

$$b(E_0) = \frac{dF_0}{dE} \Big|_{E=E_0(V)} \sim 1. \quad (6.19)$$

Для  $E_0 \ll 1$  и произвольных  $D$  получаем

$$b(E_0) \approx b(0) = - \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \frac{1}{\varepsilon(k)^2}. \quad (6.20)$$

Стоит отметить, что этот интеграл ведет себя регулярно при  $k \rightarrow 0$ , поскольку  $\alpha < D/2$ . Более подробный анализ функции  $b(E)$  представлен в Приложении В. Здесь для нас важно лишь то, что  $b(E_0) \sim 1$ .

Исходя из полученного выше, мы можем найти уровни энергии при наличии одноузельной флуктуации. В каждом интервале  $(\varepsilon_n, \varepsilon_{n+1})$  находится только один уровень  $E_n$ :

$$E_n = E_{\text{mid}}(E_n) + \epsilon \delta_1 = E_{\text{mid}}(E_n) + \frac{\delta_1(E_0)}{\pi} \arctan \left( \frac{E_{\text{mid}}(E_n) - E_0}{\Delta(E_0)} \right) \approx \begin{cases} \varepsilon_n + \frac{\delta_1(E_0) \Delta(E_0)}{\pi(E_0 - E_{\text{mid}}(E_n))}, & E_{\text{mid}}(E_n) < E_0, \quad |E_{\text{mid}}(E_n) - E_0| \gg \Delta(E_0) \\ E_{\text{mid}}(E_n) + \delta_1(E_0) \left( \frac{E_{\text{mid}}(E_n) - E_0}{\pi \Delta(E_0)} \right), & |E_{\text{mid}}(E_n) - E_0| \ll \Delta(E_0), \\ \varepsilon_{n+1} - \frac{\delta_1(E_0) \Delta(E_0)}{\pi(E_{\text{mid}}(E_n) - E_0)}, & E_{\text{mid}}(E_n) > E_0, \quad |E_{\text{mid}}(E_n) - E_0| \gg \Delta(E_0) \end{cases} \quad (6.21)$$

В случае  $|E_n - E_0| \gg \Delta(E_0)$  уровень энергии  $E_n$  практически совпадает с  $\varepsilon_n$  или  $\varepsilon_{n+1}$  и соответствующее состояние описывает практически невозмущенное делокализованное состояние. При  $|E_n - E_0| \ll \Delta(E_0)$  энергия близка к середине интервала  $E_n \approx E_{\text{mid}}(E_n)$ , что соответствует квазилокализованному состоянию, как мы видели выше. Иллюстрация того, как происходит сдвиг уровней энергии, дана на Рис. 6.1.

# Глава 7

## Делокализованное состояние

Представим функцию Грина в следующем виде:

$$g_E(\mathbf{r}) = g_{E_0}(\mathbf{r}) + [g_E(\mathbf{r}) - g_{E_0}(\mathbf{r})] \quad (7.1)$$

Первое слагаемое было найдено нами в Главе 5. Для вычисления второго будем пользоваться тем же разложением, что и в формуле (6.12), сохранив  $\psi_n(r)$  под знаком суммы. Напомним, что асимптотика сферической волны дается следующим выражением:

$$f_n(r) \approx x^{-(D-1)/2} \cos(x + \varphi_D), \quad x \equiv (K(E)r - (\pi r/L)[\epsilon - (l - 1/2)]) \gg 1, \quad (7.2)$$

где  $x$  записан в соответствии с введенным числом  $l$ . Получим тогда:

$$\begin{aligned} g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) &\approx \sum_{l=-\infty}^{\infty} \psi_{n_{\text{left}}(E)+l}(r) \psi_{n_{\text{left}}(E)+l}^*(0) \left\{ \frac{1}{[E - E_{\text{mid}}(E)] - \delta_1(l - 1/2)} - \frac{1}{-\delta_1(l - 1/2)} \right\} \approx \\ &\approx \frac{2K^{D-1}}{\sigma_D L} f(0) (Kr)^{-(D-1)/2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{[E - E_{\text{mid}}(E)] - \delta_1(l - 1/2)} - \frac{1}{-\delta_1(l - 1/2)} \right\} \\ &\quad \times \cos\{(Kr - (\pi r/L)[\epsilon - (l - 1/2)]) + \varphi_D\} \approx \\ &\approx \frac{2K^{D-1}}{\sigma_D L} f(0) (Kr)^{-(D-1)/2} \frac{1}{\delta_1} \text{Re} \left[ \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon \exp\{iKr - i(\pi r/L)[\epsilon - (l - 1/2)] + i\varphi_D\}}{[\epsilon - (l - 1/2)](l - 1/2)} \right] = \\ &= \frac{2K^{D-1}}{\sigma_D L} f(0) (Kr)^{-(D-1)/2} \frac{1}{\delta_1} \text{Re} \left[ \exp(iKr + i\varphi_D) \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon \exp\{-i(\pi r/L)[\epsilon - (l - 1/2)]\}}{[\epsilon - (l - 1/2)](l - 1/2)} \right] = \\ &= \frac{2f(0)}{\sigma_D} K^{D-1} \nu_1(E) (Kr)^{-(D-1)/2} \text{Re} [\exp(iKr + i\varphi_D) \Phi(r/L, \epsilon)], \quad (7.3) \end{aligned}$$

где

$$\Phi(z, \epsilon) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon e^{-i\pi z[\epsilon - (l - 1/2)]}}{(\epsilon - (l - 1/2))(l - 1/2)} \approx \begin{cases} -\pi \tan(\pi\epsilon) & \text{при } z \ll 1, \text{ любые } \epsilon, \\ -\pi^2(1 - |z|)\epsilon & \text{при } \epsilon \ll 1, \text{ любые } z, \\ 1/(\epsilon \mp 1/2) & \text{при } \epsilon \rightarrow \pm 1/2, \text{ любые } z, \end{cases} \quad (7.4)$$

(см. Приложение A), а  $g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) = g_E(\mathbf{r}) - g_{E_0}(\mathbf{r})$ . Нас интересует случай  $\epsilon \ll 1$  (иначе можно сразу сказать, что состояние является полностью делокализованным), в связи с чем будем

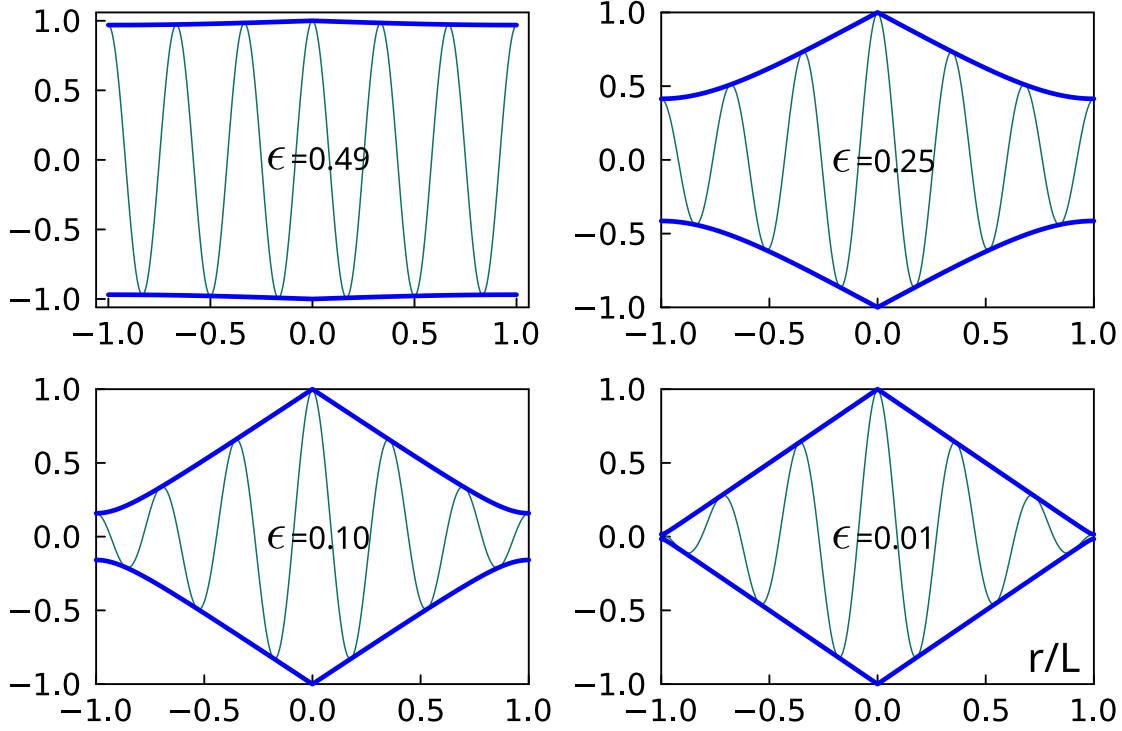


Рис. 7.1: Эволюция делокализованной части волновой функции в пространстве размерностью  $D = 1$  при изменении параметра  $\epsilon$ . (a):  $\epsilon=0.49$ , (b):  $\epsilon=0.25$ , (c):  $\epsilon=0.1$ , (d):  $\epsilon=0.01$

использовать соответствующую асимптотику из (7.4). Для делокализованной части получим:

$$g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) \approx C \frac{\epsilon \sqrt{K^{D+1}L}}{E} \tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r), \quad C = -\frac{2^{\frac{2-D}{2}} \pi^{\frac{6-D}{4}}}{3^{\frac{1}{2}} \alpha \sqrt{\Gamma(\frac{D}{2})}} \quad (7.5)$$

где нормированная делокализованная волновая функция  $\tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r)$  при  $|\epsilon| \ll 1$  имеет следующую асимптотику на  $Kr \gg 1$ :

$$\tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r) \approx \sqrt{\frac{6K^{D-1}}{\sigma_D L}} (Kr)^{-\frac{D-1}{2}} (1 - r/L) \cos(Kr + \varphi_D). \quad (7.6)$$

Вид делокализованной волновой функции  $\tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r)$  при произвольных  $\epsilon$  может быть найден только численно (см. Рис. 7.1).

Используя выражение для  $\epsilon \approx \frac{E-E_0}{\pi\Delta}$ , перепишем делокализованную часть в следующем виде:

$$g_E^{(\text{deloc})}(\mathbf{r}) \approx C' E^{\frac{1-D}{2\alpha}} (E - E_0) \sqrt{L} \tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r), \quad C' = -\frac{b(E_0) 2^{\frac{D+2}{2}} \Gamma^{\frac{3}{2}}(\frac{D}{2} + 1)}{3^{\frac{1}{2}} D^{\frac{3}{2}} \pi^{\frac{D+2}{2}}} \quad (7.7)$$

Тогда асимптотика волновой функции на больших расстояниях  $r \gg r_1$  и  $L \ll L_c$  (см. (5.14)) дается следующим выражением:

$$\psi_E(r) = [1 + u^2 L]^{-1/2} \left( \Psi_{E_0}(r) + u \sqrt{L} \tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r) \right), \quad (7.8)$$

$$u = C' E^{\frac{1-D}{2\alpha}} (E - E_0) \quad (7.9)$$

При вычислении нормировочного множителя мы учли ортогональность состояний  $\Psi_{E_0}(r)$  и  $\tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r)$  (их перекрытие стремится к нулю в термодинамическом пределе  $\propto L^{-1}$ ).

Таким образом, при  $|u|\sqrt{L} \ll 1$  состояния (7.9) являются эффективно локализованными. Сколько существует таких состояний вблизи одной оптимальной флуктуации? Для ответа на этот вопрос, запишем условие на эти состояния в следующем виде:

$$|E - E_0| \ll \frac{E^{\frac{D-1}{2}}}{\sqrt{L}} \equiv \tilde{\Delta}(E), \quad (7.10)$$

и найдем количество состояний  $M_{\text{loc}}$ , удовлетворяющих этому условию:

$$M_{\text{loc}} \equiv \frac{\tilde{\Delta}(E)}{\delta_1(E)} \sim \frac{E^{\frac{D-1}{2\alpha}} L E^{\frac{1}{\alpha}}}{\sqrt{L} E} = \sqrt{\frac{L}{L_c}} \ll 1. \quad (7.11)$$

Таким образом, есть всего лишь одно квазилокализованное состояние (расположенное в центре интервала), а все остальные практически полностью делокализованы.

# Глава 8

## Inverse Participation Ratio

Для определения “степени локализованности” волновой функции удобно исследовать Inverse Participation Ratio (IPR) – величину, определенную следующим образом:

$$P_q(E) = \sum_j |\psi_E(j)|^{2q}, \quad (8.1)$$

где  $q > 1$ . При подстановке  $q = 1$  выражение (8.1) тождественно равно единице в силу нормировки волновой функции.

Для вычисления IPR с учетом хвостов квазилокализованного состояния представим найденную ранее волновую функцию в следующем виде:

$$\psi_E(r) = [1 + u_1^2 L + u^2 L]^{-1/2} \left( \tilde{\Psi}_{E_0}(r) + u_1 \sqrt{L} \psi_{n(E)}^\perp(r) + u \sqrt{L} \tilde{\phi}_{\text{deloc}}(r) \right), \quad (8.2)$$

где  $\tilde{\Psi}_{E_0}(r) \sim r^{\alpha-D}$  – локализованная часть квазилокализованной волновой функции, а  $\psi_{n(E)}^\perp(r)$  – нормированный делокализованный хвост при  $r > r_1$ :

$$\psi_{n(E)}^\perp(r) = r_1^{\alpha-D} \sqrt{\frac{L_c}{2L\sigma_D}} \frac{\sin(Kr + \varphi_D)}{(Kr)^{\frac{D-1}{2}}}, \quad u_1 = \sqrt{\frac{2\sigma_D}{L_c}}, \quad u = C' E^{\frac{1-D}{2\alpha}} (E - E_0). \quad (8.3)$$

В следующих двух разделах мы рассмотрим по отдельности случаи  $u_1 \sqrt{L} \ll 1$ , соответствующий условию  $L \ll L_c$  (5.14), и  $u_1 \sqrt{L} \gg 1$ , т.е.  $L \gg L_c$ .

### 8.1 Ближний хвост: $L \ll L_c$

Вычисление IPR для произвольных  $q$  и  $D$  в этом случае производится следующим образом

$$P_q = \sum_j |\psi_E(j)|^{2q} \approx \frac{1 + u^{2q} L^{D(1-q)+q}}{(1 + u^2 L)^q}. \quad (8.4)$$

При фиксированном  $q$  существует критическая размерность:

$$D_{\text{cr}} = \frac{q}{q-1}, \quad (8.5)$$

смысл которой заключается в следующем: при  $D < D_{\text{cr}}$  оказывается возможным ввести 2 характерных длины:

$$\xi_1(E) \sim u^{-2}, \quad \xi_2(E, q, D) \sim u^{-\frac{2q}{D(1-q)+q}}, \quad 1 \ll \xi_1(E) \ll \xi_2(E, q, D), \quad (8.6)$$

Соответственно, в размерности, меньше критической, IPR имеет вид:

$$P_q(E, D) \approx \frac{1 + u^{2q} L^{D(1-q)+q}}{(1 + u^2 L)^q} \sim \begin{cases} 1, & L \ll \xi_1, \\ \left(\frac{\xi_1}{L}\right)^q, & \xi_1 \ll L \ll \xi_2, \\ L^{-D(q-1)}, & L \gg \xi_2. \end{cases} \quad (8.7)$$

Гораздо более интересным оказывается поведение IPR при  $D > D_{\text{cr}}$ . Тогда  $\xi_2$  не существует, а выражение (8.7) принимает вид:

$$P_q(E, D) \approx \frac{1 + u^{2q} L^{D(1-q)+q}}{(1 + u^2 L)^q} \sim \begin{cases} 1, & L \ll \xi_1, \\ \left(\frac{\xi_1}{L}\right)^q, & \xi_1 \ll L \end{cases} \quad (8.8)$$

Так, например, в случае  $D = 3$  при  $q = 2$  поведение IPR на далеких от  $E_0$  энергиях,  $\xi_1 \ll L$ , оказывается  $P_2 \propto L^{-2}$ . Такое поведение указывает на фрактальность изучаемых состояний. Определим фрактальную размерность следующим образом:

$$P_q \sim L^{-D_q(q-1)}. \quad (8.9)$$

В нашем случае получим:

$$D_q = \frac{q}{q-1} \quad \text{при} \quad q > \frac{D}{D-1} \quad (8.10)$$

При  $D > D_{\text{cr}}$ , как легко увидеть из формулы (8.10), фрактальная размерность оказывается меньше  $D$ . При  $D < D_{\text{cr}}$  формула (8.10) не имеет смысла, поскольку оказывается возможным введение  $\xi_2$  и стандартное поведение IPR для делокализованных состояний ( $D = D_q$ ) восстанавливается при  $L \gg \xi_2$ .

## 8.2 Дальний хвост: $L \gg L_c$

Запишем теперь IPR при  $u_1^2 L \gg 1$ :

$$P_q = \sum_j |\psi_E(j)|^{2q} \approx \frac{1 + u_1^{2q} L^{D(1-q)+q} + u^{2q} L^{D(1-q)+q}}{(u_1^2 L + u^2 L)^q}. \quad (8.11)$$

Здесь мы снова сталкиваемся с ситуацией, что при  $D > D_{\text{cr}} = \frac{q}{q-1}$  поведение IPR оказывается фрактальным с той же размерностью:

$$P_q \sim L^{-q}, \quad D_q = \frac{q}{q-1}. \quad (8.12)$$

Более точное соотношение имеет вид:

$$P_q(E, D) \sim \begin{cases} \left(\frac{u_1}{L}\right)^q, & |E - E_0| \ll E^{\frac{D-\alpha}{\alpha}}, \\ \left(\frac{u}{L}\right)^q, & |E - E_0| \gg E^{\frac{D-\alpha}{\alpha}}. \end{cases} \quad (8.13)$$

Таким образом, даже в тех случаях, когда в системе отсутствуют эффективно локализованные состояния, т.е. при  $L \gg L_c$ , поведение IPR отличается от стандартного.

# Глава 9

## Учет слабых флуктуаций

До сих пор мы рассматривали ситуацию, когда беспорядок в системе пренебрежимо мал и существует только одна очень сильная локальная флуктуация. К чему приводит учет типичных флуктуаций  $V \sim W$  на других узлах?

Рассмотрим снова гамильтониан (1.3) в импульсном представлении:

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon(\mathbf{k}_n) a_n^\dagger a_n + \sum_{\mathbf{nn}'} \tilde{V}_{\mathbf{n}'-\mathbf{n}} a_n^\dagger a_{\mathbf{n}'}. \quad (9.1)$$

Согласно общему принципу [11], локализация состояний на уровне энергии  $E$  становится возможной тогда, когда матричный элемент возмущения по порядку сравнивается с level-spacing'ом, т.е. возмущение начинает смешивать соседние плоские волны. Для того, чтобы оценить матричный элемент, нам понадобится:

$$\langle \tilde{V}_{\mathbf{q}} \tilde{V}_{-\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{(2L)^{-2D}} \sum_{\mathbf{j}, \mathbf{l}} \langle V_{\mathbf{j}} V_{\mathbf{l}} \rangle e^{i \frac{\pi \mathbf{q}}{L} (\mathbf{j}-\mathbf{l})} = \frac{W^2}{(2L)^D}. \quad (9.2)$$

Из равенства  $\sqrt{\langle \tilde{V}^2 \rangle} \sim \delta_D(E)$  мы приходим к следующему результату:

$$E \sim W^{-\frac{\alpha}{D-\alpha}} L^{-\frac{D\alpha}{2(D-\alpha)}} = E_{\text{mob}}. \quad (9.3)$$

Таким образом, состояния с  $E \ll E_{\text{mob}}$  являются делокализованными. Несмотря на то, что в термодинамическом пределе  $E_{\text{mob}} \rightarrow 0$ , даже при  $D = 1, 2$  в бесконечной системе выживают делокализованные состояния. Рассмотрим самые низкие по энергиям состояния, где level-spacing  $\delta_D \propto L^{-\alpha}$ . Ввиду того, что в нашем случае  $\alpha < D/2$ , вблизи дна зоны при не очень сильном беспорядке выполняется неравенство:

$$\delta_D(E) \sim L^{-\alpha} \gg WL^{-D/2} \sim \sqrt{\langle \tilde{V}^2 \rangle}, \quad (9.4)$$

что указывает на отсутствие локализации состояний вблизи дна зоны проводимости. Какое количество состояний остается делокализованными? Следуя [5], введем число  $N$  такое, что  $E_{\text{mob}} \sim (N/L)^\alpha$ . Тогда получим:

$$N \sim L^{\frac{D-2\alpha}{2(D-\alpha)}}. \quad (9.5)$$

Поскольку всего в системе  $\sim L^D$  состояний, то в термодинамическом пределе в размерностях  $D = 1, 2$  количество делокализованных состояний составляет подмножество меры нуль среди всех состояний. Рассмотрим подробнее одномерный и двумерный случаи.



## 9.1 Одномерный случай

Запишем условие (5.14) в следующем виде:

$$E \ll E_c, \quad E_c = L^{-\frac{\alpha}{D+1-2\alpha}} \quad (9.6)$$

При подстановке  $D = 1$  в  $E_c$  и  $E_{\text{mob}}$  легко видеть, что

$$E_c = W^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} E_{\text{mob}} \ll E_{\text{mob}}, \quad W \ll 1. \quad (9.7)$$

Рассмотрим одмерный образец размером  $L$  со слабым беспорядком  $W \ll 1$ . Есть три области энергий, в которых существуют различные состояния:

1.  $E_c \ll E_{\text{mob}} \ll E$ : состояния, локализованные на длине  $l_E \sim W^{-2}E^{2-\frac{2}{\alpha}}$  на типичных слабых флуктуациях  $V \sim W$  [6], [5].
2.  $E_c \ll E \ll E_{\text{mob}}$ : делокализованные состояния.
3.  $E \ll E_c \ll E_{\text{mob}}$ : сосуществование делокализованных и эффективно локализованных на длине  $r \sim 1$  состояний.

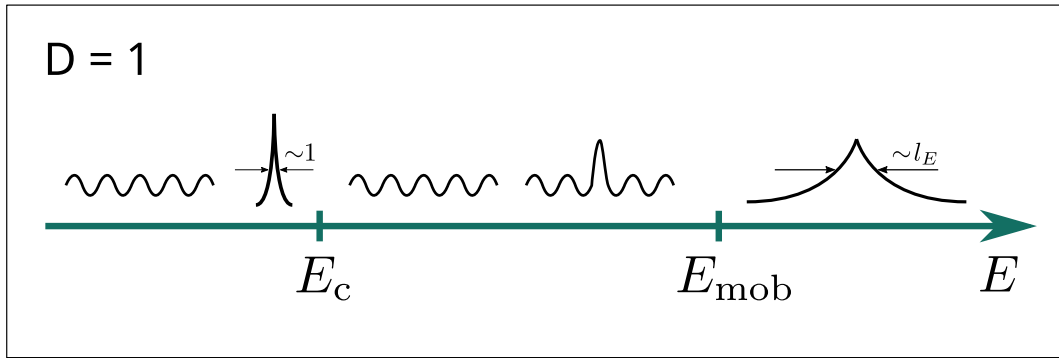


Рис. 9.1: Типы состояний в различных областях энергии в конечных одномерных системах: волнистые линии – делокализованные состояния, спадающие кривые (без волн) – локализованные состояния.

## 9.2 Двумерный случай

В случае  $D = 2$  ситуация оказывается сложнее. Сравнивая  $E_c$  и  $E_{\text{mob}}$  в двумерном случае мы приходим к следующему неравенству при достаточно больших размерах систем:

$$E_c \gg E_{\text{mob}}. \quad (9.8)$$

В то же время, длина локализации в двумерном случае экспоненциально велика [6]:

$$l_E \sim W^{-2}E^{2-\frac{2}{\alpha}} \exp \left[ cW^{-2}E^{2-\frac{2}{\alpha}} \right] \gg L_c, \quad (9.9)$$

где  $c \sim 1$  – числовая константа. Состояния с энергиями  $E \gg E_c \gg E_{\text{mob}}$  не обязательно локализованы, так как  $l_E$  все еще может быть больше  $L$ . Отсюда следует вывод о существовании другого порога подвижности в конечных двумерных системах, для которого выполняется:

$$E_{\text{mob}}^{\text{true}} \gg E_c, \quad (9.10)$$

где  $E_{\text{mob}}^{\text{true}}$  можно оценить из условия  $l_E \sim L$ . Таким образом, в случае  $D = 2$  тоже существует 3 различных энергетических области:

1.  $E_c \ll E_{\text{mob}}^{\text{true}} \ll E$ : состояния, локализованные на длине  $l_E \sim W^{-2} E^{2-\frac{2}{\alpha}} \exp \left[ c W^{-2} E^{2-\frac{2}{\alpha}} \right]$  на типичных слабых флуктуациях  $V \sim W$  [6].
2.  $E_c \ll E \ll E_{\text{mob}}^{\text{true}}$ : делокализованные состояния.
3.  $E \ll E_c \ll E_{\text{mob}}^{\text{true}}$ : сосуществование делокализованных и эффективно локализованных на длине  $r \sim 1$  состояний.

Размерности  $D \geq 3$  мы не будем здесь рассматривать.

# Глава 10

## Заключение

В данной работе нами было подробно изучено явление сосуществование локализованных и делокализованных состояний вблизи дна зоны проводимости в модели Андерсона с аномально длинными прыжками, впервые обсуждавшееся в [6].

1. Мы показали, что истинно локализованных состояний с положительными энергиями в рассматриваемой модели, строго говоря, не существует: у всех состояний при  $E > 0$  обязательно имеется незатухающий осциллирующий хвост, простирающийся до границ системы.
2. Тем не менее у некоторых низкоэнергетических состояний этот осциллирующий хвост имеет чрезвычайно малую амплитуду, так что при не слишком большом размере системы он практически не играет никакой роли. Такие состояния мы называем квазилокализованными. Мы показываем, что каждая локальная флуктуация приводит к образованию ровно одного такого состояния (7.11). Квазилокализованные состояния являются аналогами истинно локализованных состояний, возникающих при  $E < 0$  и на малых расстояниях практически от них не отличаются.
3. Мы определили явный вид квазилокализованных (5.11) и делокализованных (7.6) волновых функций. Найдено ограничение (5.14) на размер системы, при выполнении которого квазилокализованные волновые функции могут считаться эффективно локализованными.
4. При учете рассеяния на типичном беспорядке все состояния с энергиями выше порога подвижности  $E_{\text{mob}}$  оказываются локализованными. Состояния с  $E < E_c$  могут быть как делокализованными, так и квазилокализованными. Таким образом, в этой области энергий эффективно делокализованные и эффективно локализованные состояния могут сосуществовать.
5. Исследовано поведение IPR  $P_q(L)$  в различных диапазонах размеров системы  $L$ . Найдена критическая размерность (8.5), ниже которой поведение IPR оказывается стандартным (8.7), а выше – фрактальным (8.8). Найдена соответствующая фрактальная размерность (8.10). Показано, что при  $D > 1$  главный вклад в  $P_2(L)$  дает локальная часть волновой функции и это утверждение остается верным даже для больших систем, в которых главный вклад в нормировку идет от делокализованного хвоста. Это приводит к необычной зависимости  $P_2(L) \propto L^{-2}$ .

# Приложение А

## Вычисление функции $\Phi(\epsilon, z)$

В этом приложении представлено вычисление асимптотик функции  $\Phi(z, \epsilon)$ , которая встречается в Главе 7 и определяется следующим образом:

$$\Phi(z, \epsilon) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon e^{-i\pi z[\epsilon - (l-1/2)]}}{(\epsilon - (l-1/2))(l-1/2)} \quad (\text{A.1})$$

### А.1 $z \ll 1$

В случае малых  $z \ll 1$  показателем экспоненты в числителе можно пренебречь, в результате чего получается:

$$\Phi(z \ll 1, \epsilon) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon}{(\epsilon - (l-1/2))(l-1/2)} = -\pi \tan(\pi\epsilon). \quad (\text{A.2})$$

### А.2 $\epsilon \rightarrow \pm \frac{1}{2}$

В случае  $\epsilon \rightarrow \pm \frac{1}{2}$  главный вклад приходит от одного слагаемого, соответствующего  $l = 1$  или  $l = 0$ . Соответственно, получим:

$$\Phi\left(z, \epsilon \rightarrow \pm \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{\epsilon \mp \frac{1}{2}} \quad (\text{A.3})$$

### А.3 $\epsilon \ll 1$

В случае  $\epsilon \ll 1$  можно пренебречь  $\epsilon$  в знаменателе. Тогда получим:

$$\Phi(z, \epsilon \ll 1) \approx -e^{-i\pi z/2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\pi lz}}{(l-1/2)^2}. \quad (\text{A.4})$$

Разделим сумму на две части и введем переменную  $y = z/2$ :

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ilz}}{(l-1/2)^2} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{2ily}}{(l-1/2)^2} + \sum_{l=-\infty}^0 \frac{e^{2ily}}{(l-1/2)^2}. \quad (\text{A.5})$$

Знаменатель во втором слагаемом инвариантен относительно замены  $l \rightarrow -l + 1$ . Произведем ее с правильной заменой пределов суммирования:

$$\sum_{l=-\infty}^0 \frac{e^{2ily}}{(l-1/2)^2} = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-2ily+2iy}}{(l-1/2)^2} = 4e^{iy} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{-i(2l-1)y}}{(2l-1)^2}. \quad (\text{A.6})$$

Первое слагаемое можно привести к похожему виду:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{2ily}}{(l-1/2)^2} = 4e^{iy} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{e^{i(2l-1)y}}{(2l-1)^2}. \quad (\text{A.7})$$

Собирая оба куска обратно, получим:

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{e^{ilx}}{(l-1/2)^2} = 8e^{iy} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\cos(2l-1)y}{(2l-1)^2} = e^{i\frac{\pi z}{2}} \pi^2 (1-|z|), \quad (\text{A.8})$$

где был использован табличный ряд (см. [10]):

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\cos(2l-1)y}{(2l-1)^2} = \frac{\pi}{4} \left( \frac{\pi}{2} - |y| \right). \quad (\text{A.9})$$

Таким образом, мы приходим к следующему выражению:

$$\Phi(z, \epsilon \ll 1) \approx -\pi^2(1-|z|). \quad (\text{A.10})$$

# Приложение В

## Вычисление функции $b(E)$

В Главе 6 мы сталкиваемся с функцией  $b(E)$ , определенной следующим образом:

$$b(E) = \frac{\partial}{\partial E} \int_{\text{BZ}} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \frac{1}{E - \varepsilon(\mathbf{k})}. \quad (\text{B.1})$$

При вычислении производной по параметру интеграла в смысле главного значения важно иметь в виду следующее свойство:

$$\frac{\partial}{\partial E} \int_a^b \frac{f(\varepsilon) d\varepsilon}{E - \varepsilon} \neq \int_a^b f(\varepsilon) d\varepsilon \frac{\partial}{\partial E} \left( \frac{1}{E - \varepsilon} \right). \quad (\text{B.2})$$

Чтобы получить верный ответ, запишем эту производную по определению:

$$\frac{\partial}{\partial E} \int_a^b \frac{f(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)} d\varepsilon = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \frac{2}{\delta} f(E) \right] - \int_a^b \frac{f(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)^2} d\varepsilon \quad (\text{B.3})$$

и воспользуемся следующим равенством:

$$\int_a^b \frac{d\varepsilon}{(E - \varepsilon)^2} = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[ \frac{2}{\delta} \right] + \frac{1}{b - E} - \frac{1}{a - E}. \quad (\text{B.4})$$

В итоге, правильное выражение имеет следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial E} \int_a^b \frac{f(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)} d\varepsilon = \int_a^b \frac{f(E) - f(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)^2} d\varepsilon - f(E) \frac{b - a}{(E - a)(b - E)}. \quad (\text{B.5})$$

### В.1 Одномерный случай

В случае  $D = 1$  функция (B.1) может быть легко преобразована с использованием результата (B.5). Подставляя  $a = 0$ ,  $b = 2^\alpha$ ,  $f(\varepsilon) = \nu_0^{(D=1)}(\varepsilon)$  в (B.5), получим

$$b^{(D=1)}(E) = \int_0^{2^\alpha} \frac{\nu_0(E) - \nu_0(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)^2} d\varepsilon - \nu_0(E) \frac{2^\alpha}{E(2^\alpha - E)} \sim 1 \quad (\text{B.6})$$

Полученное выражение уже возможно анализировать численно. Графики  $b^{(D=1)}(E \ll 1)$  при различных  $\alpha$  приведены на Рис. B.1.

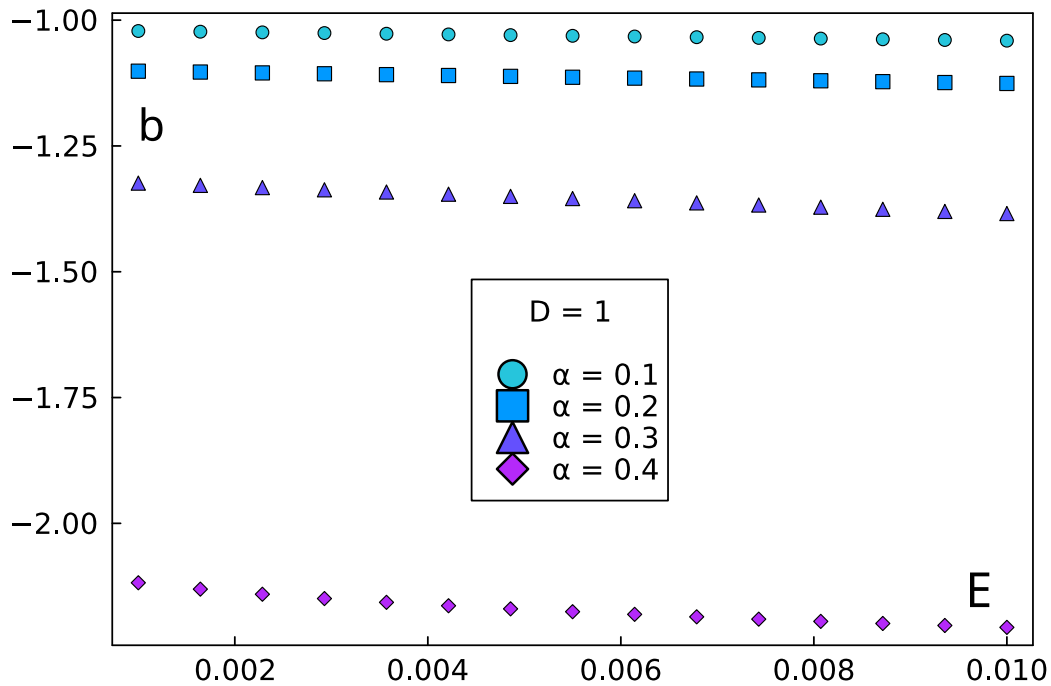


Рис. В.1:  $b^{(D=1)}(E \ll 1)$  при  $\alpha = 0.05, 0.1, 0.15, 0.2$ .

## В.2 Старшие размерности

В размерностях  $D > 1$  невозможно написать такую же удобную формулу, как мы сделали это для  $D = 1$ . Воспользуемся тем, что нас интересуют очень низкие энергии, а интеграл сходится вблизи границы зоны Бриллюэна, и разложим знаменатель по  $E$ . После взятия производной в первом ненулевом порядке получится следующее выражение:

$$b(E) \approx b(0) = - \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} \varepsilon^{-2}(k). \quad (\text{В.7})$$

Зависимость  $b(0)$  от  $\alpha$  приведена на Рис. В.2.

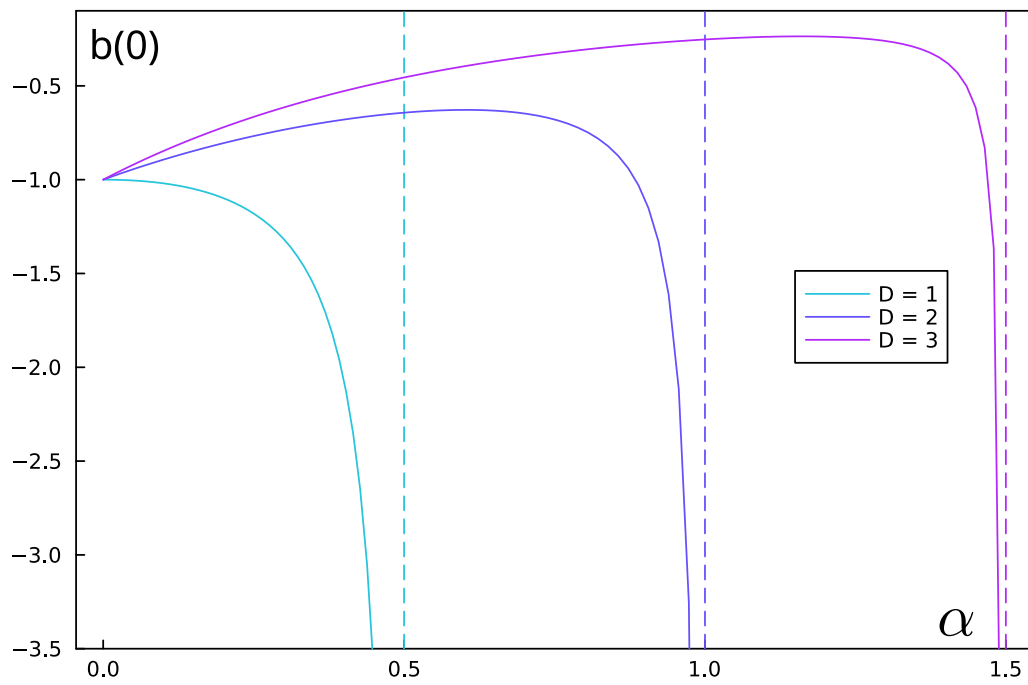


Рис. В.2:  $b(0)$  как функция  $\alpha$  в размерностях  $D = 1, 2, 3$ .



# Список литературы

- [1] P. Jurcevic и др. “Quasiparticle engineering and entanglement propagation in a quantum many-body system”. В: *Nature* 511.7508 (июль 2014), с. 202–205. ISSN: 1476-4687. DOI: [10.1038/nature13461](https://doi.org/10.1038/nature13461).
- [2] Brian C. Sawyer и др. “Spectroscopy and Thermometry of Drumhead Modes in a Mesoscopic Trapped-Ion Crystal Using Entanglement”. В: *Phys. Rev. Lett.* 108 (21 май 2012), с. 213003. DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.213003](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.213003).
- [3] S. V. Syzranov, V. Gurarie и L. Radzihovsky. “Unconventional localization transition in high dimensions”. В: *Phys. Rev. B* 91 (3 янв. 2015), с. 035133. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.035133](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.035133).
- [4] Sergey V. Syzranov и Leo Radzihovsky. “High-Dimensional Disorder-Driven Phenomena in Weyl Semimetals, Semiconductors, and Related Systems”. В: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 9.1 (2018), с. 35–58. DOI: [10.1146/annurev-conmatphys-033117-054037](https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-033117-054037). eprint: <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-033117-054037>.
- [5] F. A. B. F. de Moura и др. “Localization properties of a one-dimensional tight-binding model with nonrandom long-range intersite interactions”. В: *Phys. Rev. B* 71 (17 май 2005), с. 174203. DOI: [10.1103/PhysRevB.71.174203](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.174203).
- [6] K.S. Tikhonov, A.S. Ioselevich и M.V. Feigel'man. “Tail states and unusual localization transition in low-dimensional Anderson model with power-law hopping”. В: *Annals of Physics* 435 (2021). Special issue on Philip W. Anderson, с. 168524. ISSN: 0003-4916. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aop.2021.168524>.
- [7] Lara Faoro, Mikhail V. Feigel'man и Lev Ioffe. “Non-ergodic extended phase of the Quantum Random Energy model”. В: *Annals of Physics* 409 (2019), с. 167916. ISSN: 0003-4916. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aop.2019.167916>.
- [8] Adway Kumar Das, Anandamohan Ghosh и Ivan M. Khaymovich. *Absence of Mobility Edge in Short-range Uncorrelated Disordered Model: Coexistence of Localized and Extended States*. 2023. arXiv: [2305.02351](https://arxiv.org/abs/2305.02351) [[cond-mat.dis-nn](https://arxiv.org/abs/2305.02351)].
- [9] I.M. Lifshitz. “The energy spectrum of disordered systems”. В: *Advances in Physics* 13.52 (1964), с. 483–536. DOI: [10.1080/00018736400101061](https://doi.org/10.1080/00018736400101061). eprint: <https://doi.org/10.1080/00018736400101061>.
- [10] И С Градштейн и И М Рыжик. “Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений”. В: 1963.
- [11] P. W. Anderson. “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”. В: *Phys. Rev.* 109 (5 март 1958), с. 1492–1505. DOI: [10.1103/PhysRev.109.1492](https://doi.org/10.1103/PhysRev.109.1492).