

К ТЕОРИИ ПЕРЕХОДА АНДЕРСОНА

А. С. Бруев

УДК 535.3

Для различных решеток предложен аналитический метод расчета отношения интеграла перескока  $\Omega$  к ширине распределения  $W$  узельных энергий, при которых происходит разрушение спектра локализованных состояний.

Спектр состояний для модели Андерсона /1/ можно найти, рассчитав полюса диагонального матричного элемента  $G_{11}(\omega)$  (фурье-образ функции Грина, заданной в узельном представлении. Для этого можно использовать уравнение, содержащее собственную энергию  $\Sigma_{11}(\omega)$  /2/, /3/,

$$\omega - \varepsilon_1 - \Sigma_{11}(\omega) = 0,$$

где  $\varepsilon_1$  - узельная энергия, а  $\Sigma_{11}(\omega)$  определяется разложением

$$\begin{aligned} \Sigma_{11}(\omega) = \Omega^2 \sum_{j \neq 1} (\omega - \varepsilon_j)^{-1} + \Omega^3 \sum_{j \neq k \neq 1} (\omega - \varepsilon_j)^{-1} (\omega - \varepsilon_k)^{-1} + \\ + \dots, \end{aligned} \quad (I)$$

где  $\Omega$  - интеграл перескока. Чтобы получить спектр состояний, близкий к модели Андерсона, для произвольной реализации узельных энергий, в разложении (I) необходимо учитывать достаточно большое число членов. В связи с этим рассмотрим свойства частично усредненного матричного элемента функции Грина  $\langle G_{11}(\omega) \rangle_1$ , в котором усреднение производится по положениям всех узельных энергий, за исключением узла с номером 1. Для расчета особенностей  $\langle G_{11} \rangle_1$  удобно ввести эффективную собственную энергию  $\tilde{\Sigma}_{11}$ , определением которой служит соотношение

$$\langle \Sigma_{ii} G_{ii} \rangle = \tilde{\Sigma}_{ii} \langle G_{ii} \rangle. \quad (2)$$

В соответствии с (2) положим

$$\Sigma_{ii} = \Sigma_{ii}^{(1)} = \langle \Sigma_{ii}^{(1)} \rangle + \langle \Sigma_{ii}^{(2)} \rangle + G_{ii}^{(0)} [\langle \Sigma^{(1)2} \rangle - \langle \Sigma^{(1)} \rangle^2]$$

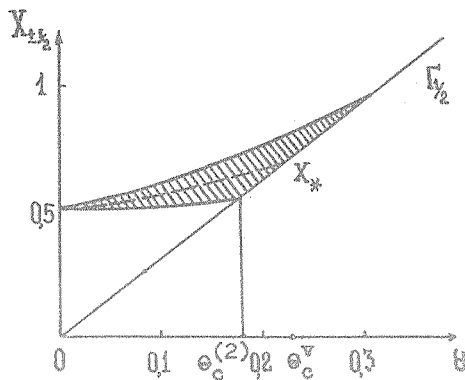
и рассмотрим случай плоской шестиугольной решетки. Для расчета особенностей функции  $\langle G_{ii}(\omega) \rangle_i$  получаем следующее уравнение:

$$x_1 - \gamma_1 - 3\theta^2 \ln \left| \frac{x_1 + 0,5}{x_1 - 0,5} \right| - \frac{6\theta^4}{x_1^2 - 0,25} \ln \left| \frac{x_1 + 0,5}{x_1 - 0,5} \right| - \frac{3\theta^4}{x_1 - \gamma_1} \left[ \frac{1}{x_1^2 - 0,25} - \ln^2 \left| \frac{x_1 + 0,5}{x_1 - 0,5} \right| \right] = 0, \quad (3)$$

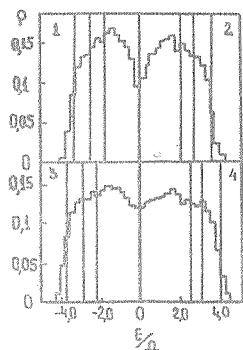
где  $x_1 = (\omega_1 - \epsilon_0)/W$ ,  $\theta = \Omega/W$ ,  $\gamma_1 = (\epsilon_1 - \epsilon_0)/W$ . Найденные с помощью (3) при  $\gamma_1 = \pm 0,5$  зависимости  $x_{\pm 0,5}(\theta)$  приведены на рис. 1. Отметим, что область значений  $x_1(\theta)$ , где функция  $\langle G_{ii}(x) \rangle_i$  имеет особенности, симметрична относительно центра  $\epsilon_0$  полосы, где распределены узельные энергии, и имеет щель, величина которой стремится к  $W$  при  $\Omega \rightarrow 0$ .

Выясним теперь, как связаны особенности функции  $\langle G_{ii}(x) \rangle_i$  со спектром состояний для модели Андерсона. Для этого сопоставим найденные зависимости  $x_{\pm 0,5}(\theta)$  с численными расчетами плотности состояний для рассматриваемой решетки /4/. Как видно из рис. 2, зависимость  $x_{+0,5}(\theta)$  с хорошей точностью совпадает с границами спектра состояний для модели Андерсона, причем соответствующая погрешность тем меньше, чем меньше параметр  $\theta = \Omega/W$ , играющий роль эффективной константы связи в данной задаче.

Сложнее определить смысл "второй границы" -  $x_{-0,5}(\theta)$ . Отметим, что в соответствии с численными расчетами плотности состояний эта граница на рис. 2 выделяет те значения энергии  $E$  ( $E/W < x_{-0,5}(\theta)$ ), при которых плотность состояний характеризуется немонотонной зависимостью от параметра  $E/\Omega$ . Возможно, что отмеченная область для плотности состояний характеризуется состояниями с неэкспоненциальным характером локализации. Кроме



Р и с. 1. Локализованные состояния в модели Андерсона для шестиугольной решетки.  $x_* = x(\theta)$  - средняя по спектру энергия,  $\Gamma_{1/2} = 3\theta$  - граница зонного спектра,  $e_c^{(2)}$ ,  $e_c^v$  - приближенное и численное значения отношения  $(\Omega/W)_c$ , соответствующего переходу Андерсона, пунктир -  $x(\theta)$



Р и с. 2. Плотность состояний для шестиугольной решетки при  $w/\Omega = 3,5$  (1); 4,0 (2); 4,5 (3); 5,0 (4). Вертикальным пунктиром соответствуют значения энергии, совпадающие с границами  $E/W = 1$ ,  $x_{-0,5}(\theta)$ ,  $x_{+0,5}(\theta)$

того, поскольку для локализованных состояний при заданной реализации узельных энергий  $\lim_{\theta \rightarrow 0} x_1(\theta) = \gamma_1$ , найденная область значений  $x_1(\theta)$  соответствует состояниям, возникающим из уровней

с узельными энергиями  $\epsilon_1 = \epsilon_0 \pm 0,5W$  и расположенным на границах полосы  $\epsilon_0 - 0,5W < \epsilon_1 < \epsilon_0 + 0,5W$ .

Важно также понять причину появления щели в области значений  $x_1(\Theta)$ . В этой связи отметим, что при конечном числе узлов  $N$  замена усреднения с непрерывным распределением на усреднение по конечному числу узлов, когда  $\langle G_{11} \rangle_1 \equiv \sum_{p \neq 1} G_{pp} / (N - 1)$ , сразу приводит к появлению особенностей функции  $\langle G_{11} \rangle_1$  в области значений  $|x_1| < 0,5$ . Это можно заметить из графического решения уравнения

$$x_1 - \gamma_1 = [3\theta^2 / (N - 1)] \sum_K (x_1 - \delta_K)^{-1},$$

где  $\delta_K = (\epsilon_K - \epsilon_0) / W$ , возникающего в том случае, если для эффективной энергии используется простейшая аппроксимация  $\tilde{\Sigma}_{11} = \langle \Sigma_{11}^{(1)} \rangle$ . Таким образом, наличие щели связано с потерей информации о спектре состояний, имеющей место при частичном усреднении элементов функции Грина.

Оказывается, что переходу Андерсона соответствуют такие значения параметра  $\Theta$ , когда ширина внутренней области, где  $|x_1| < |x_{-0,5}(\Theta)|$ , совпадает с шириной зоны  $\Gamma = 6\Theta$  в данной решетке, возникающей при  $w = 0$ . Найденное таким способом значение  $\Theta_c^{(2)}$  приведено в табл. I. Здесь же имеется значение  $\Theta_c^{(3)}$ , соответствующее следующему приближению, когда

$$\Sigma_{11} = \tilde{\Sigma}_{11}^{(1)} = \Sigma_{11}^{(1)} + \langle \Sigma_{11}^{(3)} \rangle + 2G_{11}^{(0)} [\langle \Sigma_{11}^{(2)} \Sigma_{11}^{(1)} \rangle - \langle \Sigma_{11}^{(2)} \rangle \langle \Sigma_{11}^{(1)} \rangle] + \\ + [G_{11}^{(0)}]^2 [\langle \Sigma_{11}^{(1)3} \rangle - 2\langle \Sigma_{11}^{(1)2} \rangle \langle \Sigma_{11}^{(1)} \rangle + \langle \Sigma_{11}^{(1)} \rangle^3];$$

Таблица I.

Решетки	$\Theta_c^{(2)}$	$\Theta_c^{(3)}$	$\Theta_c^v$
Шестиугольная	0,178	0,201	0,232
Квадратная	0,132	0,144	0,164

значение  $\epsilon_0^V$ , полученное из численных экспериментов на ЭВМ /4/, а также аналогичные величины, найденные для плоской квадратной решетки с числом ближайших соседей, равным четырем. Отметим, хорошее совпадение приведенных значений параметра  $\epsilon_0$ .

Такому довольно странному критерию локализации предлагается следующее объяснение. Выделим в данной решетке некоторый узел 1 и рассмотрим те узлы, которые попадают в область с центром на узле 1 и расстоянием до границы, равным радиусу некоторого заданного числа координационных сфер. Пусть узельные энергии в выделенной области (кластере) распределены случайным образом в полосе  $\epsilon_0 - 0,5W < \epsilon_i < \epsilon_0 + 0,5W$ , а остальные узлы решетки имеют одинаковые значения узельных энергий, равные  $\epsilon_0$ . Тогда спектр состояний для кластера при неограниченном числе узлов будет совпадать со спектром состояний для модели Андерсона, а при любом конечном их числе момент исчезновения первого отщепившегося от полосы энергий  $\epsilon_0 - 0,5W < \epsilon_i < \epsilon_0 + 0,5W$  уровня будет определяться условием  $x_{0,5}^{(N)}(\epsilon) = 3\epsilon$ , аналогичным использованному выше. Отметим, что в одномерном случае при  $N \rightarrow \infty$  зависимость  $\Gamma_{1/2} = 2\epsilon$  становится асимптотой для графика  $x_{0,5}^{(N)}(\epsilon)$  и, следовательно, уравнение  $x_{-0,5}(\epsilon) = 2\epsilon$  не имеет решений для действительных значений  $\epsilon$ , что находится в согласии с общим принципом возникновения в одномерном случае локализованных состояний частицы при любой степени беспорядка /5/.

Рассмотрим также особенности величины  $\langle G_{11} \rangle$ , полученной из диагонального элемента функции Грина при усреднении по всем узлам. Эффективную энергию  $\Delta$  введем в соответствии с соотношением  $\langle G_{11}^{(0)} \sum_{i1} G_{i1} \rangle = \langle G_{11}^{(0)} \rangle \Delta \langle G_{11} \rangle$ . Используя для  $\Delta$  аппроксимацию

$$\Delta \approx \frac{\langle G_{11}^{(0)} 2 \sum_{i1}^{(1)} \rangle}{\langle G_{11}^{(0)} \rangle^2} + \frac{\langle G_{11}^{(0)} 2 \sum_{i1}^{(2)} \rangle}{\langle G_{11}^{(0)} \rangle^2} + \frac{\langle G_{11}^{(0)} 3 \sum_{i1}^{(1)} \rangle^2}{\langle G_{11}^{(0)} \rangle^2} - \frac{\langle G_{11}^{(0)} 3 \sum_{i1}^{(1)} \rangle^2}{\langle G_{11}^{(0)} \rangle^3}$$

в случае плоской шестиугольной решетки для расчета особенностей  $z(\epsilon)$  функции  $\langle G_{11} \rangle$  получаем следующее уравнение

$$\frac{3\epsilon^2}{z^2 - 0,25} + \frac{3\epsilon^4 z}{z^2 - 0,25} \ln^{-1} \left| \frac{z + 0,5}{z - 0,5} \right| - \frac{3\epsilon^4}{z^2 - 0,25} +$$

$$+ \frac{6\theta^4 z}{(z^2 - 0,25)^2} \ln \left| \frac{z + 0,5}{z - 0,5} \right| = 1, \quad (4)$$

где  $z = (\omega - \varepsilon_0)/W$ . Найденная с помощью (4) зависимость  $z(\theta)$  приведена на рис. 1. Видно, что график полученной зависимости располагается в середине области  $x_1(\theta)$ , где функция  $\langle G_{11}(x) \rangle_1$  имеет особенности. Следовательно, при значениях параметра  $\theta$ , меньших порогового значения  $\theta_c$ , величина  $z(\theta)$  может быть получена непосредственно при усреднении соответствующих величин  $x_1(\theta)$ .

Автор признателен С. Опенко за обсуждение работы.

Поступила в редакцию

28 января 1983 г.

После переработки

19 октября 1983 г.

#### Л и т е р а т у р а

1. А. Л. Эйрос, УФН, 126, 41 (1978).
2. А. С. Бруев, Препринт ФИАН, № 123, М., 1981 г.
3. А. С. Бруев, Ядерная физика, 37, 1469 (1983).
4. D. G. Liciardello, P. J. Thouless, J. Phys., CS, 4157 (1975).
5. И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, "Наука", М., 1981 г.