ЖЭТФ, 2014, том 145, вып. 6, стр. 1031–1047

СКЕЙЛИНГ ДЛЯ СТАТИСТИКИ УРОВНЕЙ ИЗ САМОСОГЛАСОВАННОЙ ТЕОРИИ ЛОКАЛИЗАЦИИ

И. М. Суслов *

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы Российской академии наук
119334, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 декабря 2013 г.

Исходя из самосогласованной теории локализации Вольхардта – Вольфле выводятся соотношения конечно-размерного скейлинга для различных параметров, характеризующих статистику уровней. Результаты сопоставляются с обширным численным материалом для размерностей пространства $d = 2, 3, 4$. На уровне первичных данных результаты численных экспериментов вполне совместимы с самосогласованной теорией, а противоположные утверждения оригинальных работ связаны с неоднозначностью интерпретации и наличием малых параметров типа числа Гинзбурга.

DOI: 10.7868/S0044451014060081

1. ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа продолжает серию публикаций [1–3] по теоретическому анализу численных алгоритмов, используемых при исследовании перехода Андерсона. Мотивацией такого исследования является противоречие между численными данными (см. обзор [4]) и самосогласованной теорией Вольхардта – Вольфле [5, 6], которая воспроизводит основные теоретические результаты и, согласно некоторым аргументам [7, 8], является точной. В частности, численные результаты несовместимы с существованием верхней критической размерности $d_{c2} = 4$, которое является строгим следствием теоремы Боголюбова [9] о перенормируемости теории φ^4 [1]. Поскольку численное моделирование проводилось независимо разными группами [4, 10–17], наличие тривиальных ошибок можно считать исключенным; однако используемые алгоритмы являются эмпирическими и не основаны на твердом теоретическом фундаменте.

Предметом настоящего исследования является скейлинг для статистики уровней [10], который в настоящее время является одним из наиболее распространенных алгоритмов [11–15]. Его относительная простота связана с тем, что он основан на исследовании спектра матричных гамильтонианов и не требует вычисления собственных функций или проводимости.

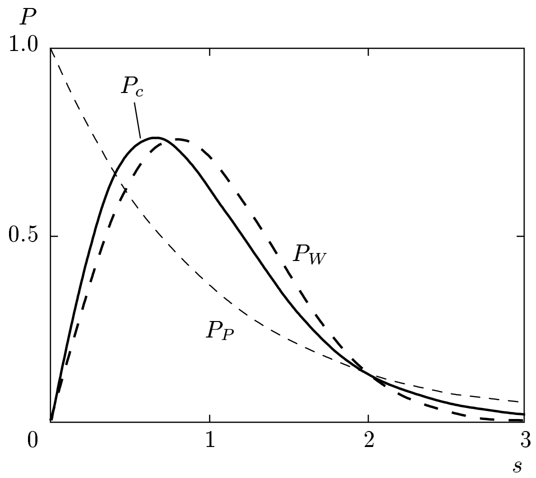

Рис. 1. Распределение $P(s)$ для расстояния между ближайшими уровнями для вигнер-дайсоновской, пуассоновской и критической статистик. Распределения $P_W(s)$ и $P_P(s)$ пересекаются в точках $s = 0.473$ и $s = 2.002$

Функцию распределения $P(\omega)$ для расстояния ω между ближайшими уровнями удобно записывать в терминах переменной

$$s = \omega/\Delta, \quad \Delta = 1/\nu_F L^d, \tag{1}$$

где $\Delta = \langle\omega\rangle$ — среднее расстояние между уровнями в конечной системе, имеющей форму d-мерного куба

* E-mail: suslov@kapitza.ras.ru

со стороной L, ν_F — плотность состояний на уровне Ферми. Актуальными являются три базовых распределения [10]: вигнер-дайсоновское $P_W(s)$; пуассоновское $P_P(s)$ и критическое $P_c(s)$ (рис. 1):

$$P_W(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right), \tag{2}$$

$$P_P(s) = e^{-s}, \tag{3}$$

$$P_c(s) = \begin{cases} \sim s, & s \ll 1, \\ \sim e^{-s/2\kappa}, & s \gg 1, \end{cases} \tag{4}$$

которые соответственно реализуются в металлической фазе, в локализованном состоянии и в критической области. Если система находится в критической точке, то распределение уровней совпадает с $P_c(s)$ независимо от ее размера L. При отклонении от критической точки распределение $P(s)$ плавно эволюционирует с ростом L, выходя в пределе на $P_W(s)$ или $P_P(s)$. Для количественного контроля такой эволюции можно рассмотреть интеграл по области больших s,

$$I(s_0) = \int\limits_{s_0}^{\infty} P(s)\, ds, \tag{5}$$

и ввести скейлинговый параметр

$$\alpha(s_0) = \frac{I(s_0) - I_W(s_0)}{I_P(s_0) - I_W(s_0)}, \tag{6}$$

который меняется от нуля до единицы при переходе от металла к диэлектрику. Если постулировать скейлинговое соотношение

$$\alpha = F\left(L/\xi\right), \tag{7}$$

то эволюция α при изменении L позволяет исследовать критическое поведение корреляционного радиуса ξ [10].

Аналогично можно рассмотреть интеграл по области малых s,

$$\tilde{I}(s_0) = \int\limits_{0}^{s_0} P(s)\, ds, \tag{8}$$

и определить скейлинговый параметр $\tilde{\alpha}(s_0)$ аналогично (6), который, ввиду соотношения $\tilde{I}(s_0) = 1 - I(s_0)$, формально совпадает с $\alpha(s_0)$. Однако практически в определении (5) обычно используют выделенное значение $s_0 = 2.002$, при котором пересекаются все три распределения (см. рис. 1), тогда как в определении (8) принимают $s_0 = 0.473$, что соответствует второй точке пересечения зависимостей $P_W(s)$ и $P_P(s)$.

Еще одним вариантом скейлингового параметра является коэффициент A в зависимости

$$I(s) = e^{-As}, \tag{9}$$

который стремится к постоянному пределу при $s \to \infty$; для него можно также постулировать скейлинговое соотношение типа (7). Более сложные варианты скейлинговых параметров использовались при анализе двумерного [13] и четырехмерного [14] случаев (см. разд. 7, 8).

Основные вопросы связаны со скейлинговыми соотношениями типа (7): они не имеют места для произвольных величин, заведомо несправедливы в высших размерностях и могут существенно искажаться из-за поправок к скейлингу. Ниже показано, что самосогласованная теория локализации [5, 6] позволяет установить соотношения типа (7) для всех перечисленных параметров, а полученные скейлинговые функции могут быть сопоставлены с обширным численным материалом [10–15]. При этом, как и в работах [1–3], выясняется, что первичные численные данные вполне совместимы с теорией Вольхардта–Вольфле, а противоположные утверждения соответствующих авторов связаны с неоднозначностью интерпретации и наличием малых параметров типа числа Гинзбурга.

2. КВАЗИГАУССОВСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ

Вычисление функции распределения $P(s)$ практически невозможно ни в одной из реалистичных моделей, что делает теоретический анализ алгоритма весьма проблематичным. Такой анализ становится, однако, возможным, если сознательно пойти на некоторые огрубления. Таким огрублением является квазигауссовская концепция, предложенная в работе [18].

Пусть N — число уровней в интервале шириной E вблизи уровня Ферми ϵ_F (рис. 2); в дальнейшем принимаем $\epsilon_F = 0$. Если флуктуации N малы, то естественно ожидать, что их распределение будет гауссовским,

$$P(N) \sim \exp\left\{-\frac{(N - \langle N\rangle)^2}{2\sigma^2}\right\}, \tag{10}$$

где σ^2 зависит от $\langle N\rangle$. Вероятность того, что в интервале E нет ни одного уровня, определяется формулой (10) с $N = 0$. В терминах введенных выше

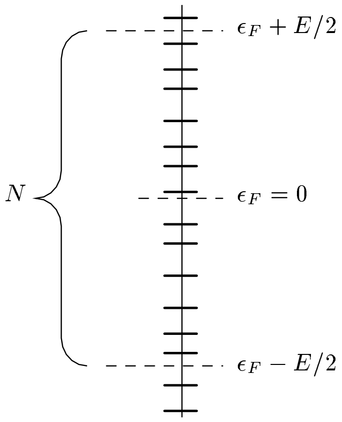

Рис. 2

величин это означает, что $\omega = s\Delta$ может принимать любое значение, большее E; это соответствует интегралу (5) с $s_0 = E/\Delta$. С учетом зависимости σ^2 от $\langle N\rangle = E/\Delta = s_0$ имеем

$$I(s_0) \sim \exp\left(-\frac{s_0^2}{2\sigma^2(s_0)}\right). \qquad (11)$$

Поскольку интегрирование $P(s)$ не меняет основной экспоненциальной зависимости, для воспроизведения выражений (2)–(4) нужно положить

$$\sigma_W^2(s) = 2/\pi, \quad \sigma_P^2(s) = s/2, \quad \sigma_c^2(s) = \kappa s. \qquad (12)$$

Прямое вычисление среднеквадратичной флуктуации

$$\sigma_0^2 = \langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2 \qquad (13)$$

дает

$$(\sigma_0^2)_W = (2/\pi^2)\ln s, \quad (\sigma_0^2)_P = s, \quad (\sigma_0^2)_c = \kappa_0 s, \qquad (14)$$

где первое выражение — результат Дайсона [19], второе — известный результат для пуассоновского распределения [20], третье получено в работе [18] из скейлинговых соображений [21] и подтверждено численно [11]. Заметим, что [11, 14]

$$\begin{aligned} &\kappa_0 = 0.28 \pm 0.03, \quad \kappa = 0.26 \pm 0.01 \quad (d=3),\\ &\kappa_0 = 0.45 - 0.50, \quad \kappa \approx 0.36 \quad (d=4), \end{aligned} \qquad (15)$$

т. е. κ и κ_0 близки, но не тождественны. Сравнение выражений (12) и (14) показывает порядковое совпадение величин σ^2 и σ_0^2 за исключением вигнер-дайсоновского случая, где они различаются логарифмическим фактором. Последнее расхождение не удивительно. Распространенность гауссовского распределения обусловлена существованием центральной предельной теоремы; из вывода последней ясно [22], что гауссовская форма справедлива лишь вблизи максимума распределения, тогда как его хвосты остаются неуниверсальными. Проведенное рассуждение справедливо в некотором интервале значений s, достаточно больших для реализации экспоненциальных асимптотик в выражениях (2)–(4), но достаточно малых для грубой справедливости гауссовского распределения (10) в окрестности $N = 0$; при любых разумных ограничениях на s имеем $\ln s \sim 1$ и порядковое совпадение σ^2 и σ_0^2 действительно имеет место. Последние две величины меняются в широких пределах и их различие на медленно меняющуюся функцию малосущественно — в рамках принимаемой схемы огрубления ее можно заменить на константу. Таким образом, эволюция распределения $P(s)$ в основном определяется величиной σ_0^2, которая допускает теоретическое исследование (разд. 3).

Подстановка соотношения (11) в (6) показывает, что при больших s_0 можно пренебречь величиной $I_W(s_0)$, так что

$$\alpha(s_0) = \exp\left\{-\frac{s_0^2}{2\sigma^2} + \frac{s_0^2}{2\sigma_P^2}\right\} = \exp\left\{-s_0\frac{\sigma_P^2 - \sigma^2}{\sigma^2}\right\}, \qquad (16)$$

и параметр $\alpha(s_0)$ отличен от нуля лишь при $\sigma_P^2 - \sigma^2 \ll \sigma_P^2$ и практически исчезает в вигнер-дайсоновской области $\sigma^2 \sim \sigma_W^2$. Сопоставление выражений (11) и (9) показывает, что

$$A = \frac{s}{2\sigma^2} = \frac{\sigma_P^2}{\sigma^2}, \qquad (17)$$

так что скейлинговые параметры $\alpha(s_0)$ и A определяются одной комбинацией σ^2/σ_P^2; то же справедливо и для более сложных параметров (см. разд. 7, 8).

3. ДИАГРАММНЫЙ АНАЛИЗ

Вычисление σ_0^2 в рамках диаграммной техники впервые рассматривалось Альтшулером и Шкловским [23]. Имея в виду дальнейшие обобщения, обсудим более подробно принцип отбора диаграмм.

Число уровней N в интервале E выражается через точную плотность состояний $\nu(\epsilon)$ конечной системы:

$$N = L^d \int_{-E/2}^{E/2} \nu(\epsilon)d\epsilon, \quad \nu(\epsilon) = L^{-d}\sum_n \delta(\epsilon - \epsilon_n), \qquad (18)$$

тогда как его среднеквадратичная флуктуация

$$\sigma_0^2 = L^{2d} \int\limits_{-E/2}^{E/2} d\epsilon_1 \int\limits_{-E/2}^{E/2} d\epsilon_2 \, K(\epsilon_1, \epsilon_2) \qquad (19)$$

определяется коррелятором

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \langle \nu(\epsilon_1)\nu(\epsilon_2)\rangle - \langle \nu(\epsilon_1)\rangle\langle \nu(\epsilon_2)\rangle. \qquad (20)$$

В литературе обычно рассматривается величина $R(\omega)$, определяющая вероятность нахождения на расстоянии ω двух любых уровней (а не ближайших, как в случае $P(\omega)$); она просто связана с $K(\epsilon_1, \epsilon_2)$:

$$R(\omega) = \frac{\langle \nu(E+\omega)\nu(E)\rangle}{\langle \nu\rangle^2} = \frac{K(E+\omega, E)}{\langle \nu\rangle^2} + 1 \qquad (21)$$

(считаем, что $\langle \nu(\epsilon)\rangle \equiv \nu_F$ не зависит от ϵ) и выражается через двухчастичные функции Грина:

$$R(\omega) = \frac{\Delta}{2\pi^2 \nu_F} \operatorname{Re} \frac{1}{L^{2d}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\Phi^{RA}_{\mathbf{kk}}(\mathbf{q}) - \Phi^{RR}_{\mathbf{kk}}(\mathbf{q})\right]. \qquad (22)$$

Здесь $\Phi^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ — фурье-образ величины

$$\Phi^{RA}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4) = \left\langle G^R_{E+\omega}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G^A_E(\mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4)\right\rangle \qquad (23)$$

с учетом введенных на рис. 3 трехимпульсных обозначений, а $\Phi^{RR}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ определяется аналогично. Вводя вершинные функции $\Gamma^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ и $\Gamma^{RR}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ (рис. 3), получим

$$R(\omega) = 1 + \frac{\Delta}{2\pi^2 \nu_F} \operatorname{Re} \frac{1}{L^{2d}} \times \\ \times \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} P_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) \Gamma^{RA}_{\mathbf{kk}}(\mathbf{q}) P_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}), \qquad (24)$$

где $P_{\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = G^R_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2} G^A_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2}$ и учтено, что вершина $\Gamma^{RR}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ не дает вклада из-за отсутствия диффузионных полюсов (см. ниже). Существенный момент связан с наличием в (24) множителя $\Delta = 1/\nu_F L^d$ перед суммой по импульсам. Если вершина $\Gamma^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ регулярна, то переход от суммирования к интегрированию по обычному правилу

$$\frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}} \ldots \to \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \ldots$$

дает в (24) конечное выражение, умноженное на Δ, что исчезает в термодинамическом пределе. В действительности вершина $\Gamma^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ содержит сингулярные вклады, связанные с диффузионными полюсами, — так называемые диффузоны и купероны (рис. 4*а,б*), которые при определенных значениях импульсов дают особенности $1/\omega$. Фиксация импульса на одном значении (вместо суммирования) дает множитель $L^{-d} \propto \Delta$; если, зафиксировав $n-1$ импульсов, удается обратить в нуль импульсные члены в n диффузионных знаменателях, то это дает в (24) вклад $\Delta^n/\omega^n = 1/s^n$, который в терминах переменной s остается конечным в термодинамическом пределе. Простейшая диаграмма, обладающая таким свойством — двухкуперонная[1)] (рис. 4*в*):

$$\Gamma^{CC}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q}) \sim \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{k}_1} \frac{1}{-i\omega + D_0(\mathbf{k}+\mathbf{k_1})^2} \times \\ \times P_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{q}) \frac{1}{-i\omega + D_0(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}')^2} \qquad (25)$$

(D_0 — классический коэффициент диффузии). Поскольку в (24) входит вершина с $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$, фиксация импульса $\mathbf{k}_1$ на значении $-\mathbf{k}$ обращает в нуль импульсную часть двух диффузионных знаменателей и дает в $R(s)$ вклад порядка $1/s^2$; учитывая, что такой же вклад дает диаграмма, получаемая из двухкуперонной разворотом нижней G-линии[2)], имеем

$$R(s) = 1 - \frac{1}{\pi^2 s^2}, \quad s = \frac{\omega}{\Delta}, \qquad (26)$$

что является началом разложения по $1/s$. Вклад $1/s^{2n}$ дают, в частности, лестничные диаграммы, содержащие $2n$ куперонов (рис. 4*в*). Суммирование всех подобных вкладов должно приводить к воспроизведению результата Ефетова [25] ($x = \pi s$)

$$R(x) = 1 - \frac{\sin^2 x}{x^2} + \frac{\sin x - x\cos x}{x^2} \int\limits_1^\infty \frac{\sin xt}{t}\, dt = \\ = \begin{cases} \dfrac{\pi}{6} x, & x \ll 1, \\ 1 - \dfrac{1}{x^2} + \dfrac{1+\cos^2 x}{x^4}, & x \gg 1, \end{cases} \qquad (27)$$

который соответствует вигнер-дайсоновскому распределению. Любопытно, что суммирование куперонной лестницы (рис. 4*в*) приводит к результату

$$R(x) = \frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{dt}{\sqrt{1+t^2}\sqrt{1+t^2+4x^{-2}}} \qquad (28)$$

который неплохо аппроксимирует (27) (рис. 5). При его улучшении наибольшую трудность представляет воспроизведение слабых осцилляций, практически незаметных на рис. 5; последние имеют непертурбативный характер и могут быть получены лишь

[1)] Впервые рассматривалась Булаевским и Садовским [24], а затем использовалась в [23].

[2)] Множитель 2, связанный с возможностью разворота нижней G-линии, учитывается далее при суммировании куперонной лестницы.

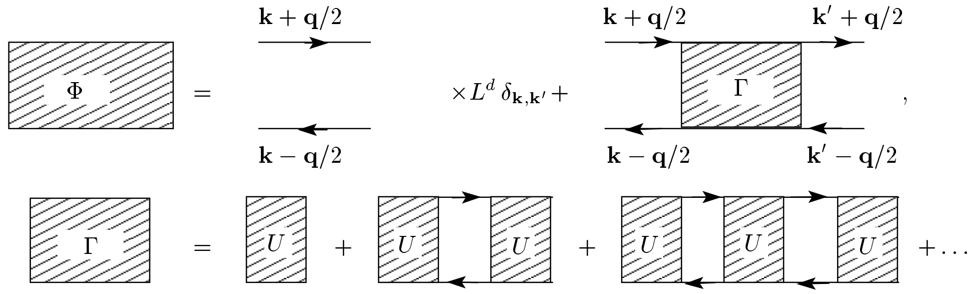

Рис. 3. Связь функции $\Phi^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ с полной вершиной $\Gamma^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$ и неприводимой четырехвосткой $U^{RA}_{\mathbf{kk}'}(\mathbf{q})$

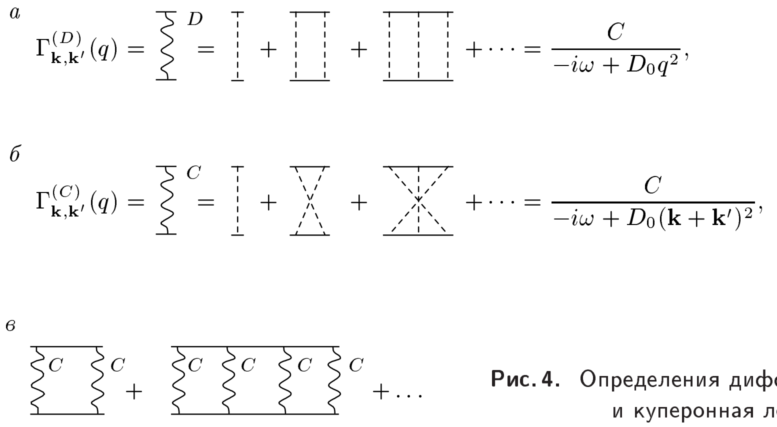

Рис. 4. Определения диффузона (*а*), куперона (*б*) и куперонная лестница (*в*)

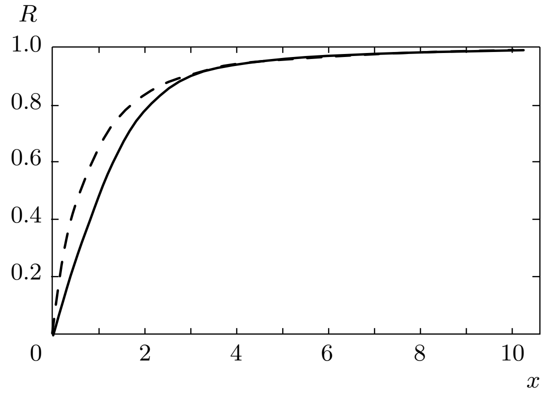

Рис. 5. Сопоставление точного результата Ефетова (сплошная линия) с вкладом куперонной лестницы (штриховая линия)

при учете факториальной расходимости ряда и его надлежащего суммирования [26, 27].

Аналог результата (26) для $K(\epsilon_1,\epsilon_2)$ имеет вид [23]

$$K(\epsilon_1,\epsilon_2) = \frac{1}{\pi^2 L^{2d}}\,\mathrm{Re}\left(\frac{1}{-i\omega+\gamma}\right)^2, \qquad \omega = \epsilon_1 - \epsilon_2, \tag{29}$$

где добавлено затухание γ, связанное с неупругими процессами или открытостью системы[3]. Подстановка в (19) приводит к результату[4] [23]

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{\pi^2}\ln\frac{E^2+\gamma^2}{\gamma^2}, \tag{30}$$

который при $\gamma \sim \Delta$ совпадает с дайсоновским (см. (14)). Причина последнего состоит в следующем. Если искусственно ввести достаточно большое затухание γ, то двухкуперонный вклад (29) является главным членом разложения по Δ/γ и результат

[3] Если мнимые добавки $\pm i0$ в определении G^R и G^A заменить на $\pm i\gamma/2$, то происходит замена $-i\omega \to -i\omega+\gamma$ во всех диффузионных знаменателях [2].

[4] На первый взгляд, результат (30) выглядит странным: выражение (29) локализовано при $|\omega| \lesssim \gamma$ и должно давать вклад $1/\gamma$ при интегрировании по ω, приводящий к E/γ в результате второго интегрирования в (19). В действительности интеграл по ω в бесконечных пределах равен нулю и оказывается конечным лишь из-за ограничения интервала интегрирования — это дает вклады $1/\epsilon_1$ и $1/(E-\epsilon_1)$, переходящие в логарифмы при интегрировании по ϵ_1.

(30) является правильным. Дайсоновское выражение (14) относится к закрытым системам и предполагает $\gamma = 0$. Однако условия применимости (29) позволяют уменьшать γ только до величины порядка Δ; к счастью, при $\gamma \lesssim \Delta$ зависимость от γ практически отсутствует[5)] и результат (30) сшивается с дайсоновским. Аналогичная аргументация используется для более сложной ситуации (разд. 4).

Если не ограничиваться в (25) членом с $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}$, а учесть в сумме по $\mathbf{k}_1$ вклад импульсов, близких к $-\mathbf{k}$, то вместо (29) получим [23]

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{1}{\pi^2 L^{2d}} \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{1}{-i\omega + \gamma + D_0 q^2} \right)^2. \quad (31)$$

Ограничение членом $\mathbf{q} = 0$ оправдано при $E \ll D_0/L^2$, тогда как в обратном предельном случае можно перейти от суммирования к интегрированию и при $E \gg \gamma$ получить [23]

$$\sigma_0^2 = \frac{1}{\pi^2} \sum_{\mathbf{q}} \ln \left[1 + \frac{E^2}{(\gamma + D_0 q^2)^2} \right] = a_d \left(\frac{L}{L_E} \right)^d, \qquad a_d = \frac{K_d}{\pi d \sin(\pi d/4)}, \quad (32)$$

где $L_E = \sqrt{D_0/E}$ — длина диффузии за время $1/E$, $K_d = \left[2^{d-1} \pi^{d/2} \Gamma(d/2) \right]^{-1}$ — площадь единичной сферы в d-мерном пространстве, деленная на $(2\pi)^d$.

4. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ САМОСОГЛАСОВАННОЙ ТЕОРИИ

Следующий шаг сделан Кучинским и Садовским [28]. Результаты (30), (32) справедливы в глубине металлической фазы, и можно попытаться расширить область их применимости, если в духе самосогласованной теории локализации [5, 6] заменить D_0 в (31) на полный коэффициент диффузии $D(\omega, q)$ [28]. Такой подход может быть мотивирован следующим образом. Неприводимая вершина U^{RA} (см. рис. 3) содержит диффузионный полюс[6)]

$$U^{RA}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) = U^{reg}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{q}) + \frac{F(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})}{-i\omega + D(\omega)(\mathbf{k} + \mathbf{k}')^2} \quad (33)$$

с наблюдаемым коэффициентом диффузии $D(\omega)$. Аналогом двухкуперонной диаграммы (см. рис. 4*в*) является диаграмма с двумя блоками U (см. рис. 3) — она является главной в металлической фазе и при определенных условиях сохраняет доминирование за ее пределами[7)]. В окрестности полюса можно положить $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$ в функции $F(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q})$ и после интегрирования по $\mathbf{k}, \mathbf{q}$ в (24) ее роль сводится к появлению в (31) дополнительного множителя k_σ; он является медленной функцией расстояния до перехода, которую мы, в соответствии с принятой схемой огрубления (разд. 2), заменяем на константу:

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{k_\sigma \nu_F^2}{\pi^2} \operatorname{Re} \sum_{\mathbf{q}} \left[\frac{\Delta}{-i\omega + D(\omega) q^2} \right]^2. \quad (34)$$

Как показано в работе [2], в конечной закрытой системе коэффициент диффузии имеет локализационный характер:

$$D(\omega) = (-i\omega) \xi_{0D}^2, \quad (35)$$

где ξ_{0D} — корреляционный радиус конечной системы, рассматриваемой как квазинульмерная. Неупругое затухание γ вводится заменой $-i\omega \to -i\omega + \gamma$, которая делается как в $D(\omega)$, так и в члене $-i\omega$ [2]. Тогда

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{k_\sigma \nu_F^2}{\pi^2} \operatorname{Re} \frac{\Delta^2}{(-i\omega + \gamma)^2} F\left(\frac{\xi_{0D}}{L} \right), \quad (36)$$

где функция $F(x)$ определяется как

$$F(x) = \sum_{\mathbf{s}} \left[\frac{1}{1 + (2\pi x \mathbf{s})^2} \right]^2 \quad (37)$$

и имеет асимптотики

$$F(x) = \begin{cases} 1 + O(1/x^4), & x \gg 1, \\ \tilde{c}_d / x^d, & x \ll 1 \end{cases} \quad (38)$$

(здесь $\mathbf{s} = (s_1, \ldots, s_d)$ — вектор с целочисленными компонентами $s_i = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots$ и $\tilde{c}_d = \pi K_d (1 - d/2)/2 \sin(\pi d/2)$). Подстановка (36) в (19) дает вместо (30)

$$\sigma_0^2 = \frac{k_\sigma}{\pi^2} \ln \frac{E^2 + \gamma^2}{\gamma^2} F\left(\frac{\xi_{0D}}{L} \right). \quad (39)$$

5) Это ясно из того, что значение $R(s)$ при $s = 0$ получается из (26) при $s \sim 1$.

6) Возможность пренебрежения пространственной дисперсией коэффициента диффузии обоснована в [8].

7) Диаграммы с нечетным числом блоков U содержат дополнительную малость по параметру E/γ_e, где γ_e — упругое затухание, имеющее порядок ширины зоны в критической области. В терминах блоков U все диаграммы являются лестничными: в этом смысле куперонная лестница (рис. 4*в*) соответствует суммированию наиболее сингулярных вкладов. Диаграмма с двумя блоками U является первой диаграммой в этой последовательности, тогда как высшие диаграммы обсуждаются ниже.

Используемое приближение должно обеспечивать правильное описание в области $\omega \sim \gamma$, которая имеет существенное значение при интегрировании по ϵ_1, ϵ_2 в (19) (см. примечание 4) и в которой (36) есть главный член разложения по Δ/γ. Пример лестничных диаграмм (рис. 4*в*) показывает, что существуют вклады

$$\left[\frac{\Delta^2}{\gamma^2} F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right)\right]^n \tag{40}$$

со всеми n, так что минимальное значение γ, при котором справедливо выражение (36), определяется условием

$$\frac{\gamma_{min}^2}{\Delta^2} \sim F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right), \tag{41}$$

и введенное неупругое затухание нельзя сделать меньше этой величины. Поскольку при $\gamma \lesssim \gamma_{min}$ зависимость от γ практически отсутствует (см. ниже), значение $K(\epsilon_1, \epsilon_2)$ в (36) при $\gamma = 0$ можно оценить, полагая $\gamma \sim \gamma_{min}$. При переходе к (39) оказывается существенной зависимость ξ_{0D} от ω (см. разд. 5), интегрирование которой в (19) эффективно добавляет к γ^2 величину порядка E^2; поэтому следует полагать

$$\gamma^2 = k_1 E^2 + k_2 \gamma_{min}^2, \tag{42}$$

где константы k_1 и k_2 обсуждаются ниже. Таким образом,

$$\sigma_0^2 = \frac{k_\sigma}{\pi^2} F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right) \ln \frac{s^2 + k_1 s^2 + k_2 F(\xi_{0D}/L)}{k_1 s^2 + k_2 F(\xi_{0D}/L)}. \tag{43}$$

При движении в глубь локализованной фазы $F(\xi_{0D}/L) \to \infty$ и σ_0^2 выходит на константу, для которой выбором $k_2 = k_\sigma s/\pi^2$ можно обеспечить пуассоновское значение $\sigma_P^2 = s$; в результате

$$\frac{\sigma_0^2}{\sigma_P^2} = u \ln \frac{1 + k_1 + u}{k_1 + u}, \qquad u = \frac{k_\sigma}{\pi^2 s} F\left(\frac{1}{z}\right), \quad z = \frac{L}{\xi_{0D}}. \tag{44}$$

Величина ξ_{0D}/L является функцией ξ/L [2], что обосновывает существование скейлинга для σ_0^2/σ_P^2.

Обсудим смысл соотношения (42) и зависимость от γ при $\gamma \lesssim \gamma_{min}$. Физическая интерпретация результата (32) состоит в том, что система разбивается на квазинезависимые блоки размера L_E [23]; нетривиальные свойства σ_0^2 формируются на масштабе L_E, тогда как на бóльших масштабах дисперсии складываются как для независимых случайных величин. Открытость каждого блока приводит к диффузионному затуханию $D/L_E^2 = E$ его состояний, к которому добавляется неупругое затухание γ. Их сложение происходит по закону квадратов, так как технически связано с оценкой $\mathrm{Re}(-i\omega + \gamma) \sim (\omega^2 + \gamma^2)^{1/2}$ при $\omega \sim E$ (см. разд. 5). Неупругое затухание γ является несущественным на фоне диффузионного при условии $\gamma \lesssim E$. Ниже показано (разд. 5), что $\gamma_{min} \sim E$ в критической области и $\gamma_{min} \ll E$ в металлической области, чем обеспечена независимость от γ при $\gamma \lesssim \gamma_{min}$ для этих областей. В локализованном режиме масштаб L_E сводится к ξ и выполняется соотношение $E \ll \Delta_\xi$, где Δ_ξ — расстояние между уровнями в блоке размера ξ. При этом условии вероятность p_n нахождения n уровней в интервале E для такого блока легко оценивается:

$$p_0 \approx 1 - \frac{E}{\Delta_\xi}, \quad p_1 = \frac{E}{\Delta_\xi}, \quad p_{n \geq 2} \approx 0,$$

так что $\langle N \rangle \approx E/\Delta_\xi$, $\langle N^2 \rangle \approx E/\Delta_\xi$ и величина σ_0^2 близка к пуассоновскому значению независимо от реальной статистики уровней. Затухание γ можно рассматривать как результат случайного процесса, приводящего к разбросу положения каждого уровня вблизи его среднего значения; тогда независимость от статистики означает независимость от γ. Таким образом, слабая зависимость от γ при $\gamma \lesssim \gamma_{min}$ имеет место во всех случаях.

5. СКЕЙЛИНГ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ И ЗАВИСИМОСТЬ ОТ ω

В предыдущем разделе неявно предполагалось, что величина ω достаточно мала. В общем случае это не выполняется и зависимость от ω требует дополнительного анализа.

В закрытой конечной системе коэффициент диффузии имеет локализационное поведение (35). При переходе к открытым системам происходит замена $-i\omega \to -i\omega + \gamma$ и возникает статический коэффициент диффузии $\gamma\xi_{0D}^2$, приводящий к конечному кондактансу g_L. В работе [2] получены скейлинговые соотношения для g_L и ξ_{0D}:

$$g_L = H_T\left(\frac{L}{\xi_{0D}}\right), \quad \pm c_d \left(\frac{L}{\xi}\right)^{d-2} = H\left(\frac{L}{\xi_{0D}}\right), \tag{45}$$

где $c_d = \pi K_d/|2\sin(\pi d/2)|$ и функции $H(z)$, $H_T(z)$ имеют асимптотики

$$H(z) = \begin{cases} 1/z^2, & z \ll 1, \\ -c_d z^{d-2}, & z \gg 1, \end{cases} \qquad H_T(z) = \begin{cases} 1/z^2, & z \ll 1, \\ \sim e^{-z}, & z \gg 1. \end{cases} \tag{46}$$

Для затухания γ_0, возникающего за счет открытости системы, справедливо соотношение

$$\frac{\gamma_0}{\Delta} = z^2 H_T(z), \quad z = \frac{L}{\xi_{0D}}, \tag{47}$$

так что величина γ_0/Δ равна единице в металлической фазе, несколько меньше единицы в критической области и экспоненциально убывает в глубь локализованной фазы. Неупругое затухание γ, которое приходится вводить для применимости формул, обычно оказывается значительно больше, и на его фоне затухание γ_0 несущественно. Эти соотношения справедливы в пределе нулевой частоты и требуют пересмотра при конечных частотах.

Уравнение самосогласования теории Вольхардта–Вольфле будем писать в виде [1]

$$\frac{\mathcal{E}^2}{W^2} = \frac{D(\omega)}{D_{min}} + \Lambda^{2-d} \int\limits_0^\Lambda \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{[-i\omega/D(\omega)] + q^2}, \tag{48}$$

где $\mathcal{E}$ — энергия порядка ширины зоны, W — амплитуда случайного потенциала, Λ — параметр обрезания по импульсу, D_{min} — характерный масштаб коэффициента диффузии, соответствующий моттовской минимальной проводимости σ_{min}, пределы интегрирования указаны для модуля q.

При конечных L уравнение (48) принимает следующий вид в открытой и закрытой системах [2]:

$$\frac{\mathcal{E}^2}{W^2} = \frac{-i\omega\xi_{0D}^2}{D_{min}} + \Lambda^{2-d}\frac{1}{L^d}\sum_{\mathbf{q}}^{(c)} \frac{1}{q^2+m^2}, \quad m^{-1} = \xi_{0D}, \tag{49}$$

$$\frac{\mathcal{E}^2}{W^2} = \frac{D_L(\omega)}{D_{min}} + \Lambda^{2-d}\frac{1}{L^d}\sum_{\mathbf{q}}^{(o)} \frac{1}{q^2+m^2}. \tag{50}$$

Значки (c) и (o) отмечают разрешенные значения импульсов, характерные для закрытых и открытых систем: главным моментом является наличие члена с $\mathbf{q} = 0$ в первом случае и его отсутствие во втором [2]. Первое уравнение определяет ξ_{0D}, а разность двух уравнений — коэффициент диффузии $D_L(\omega)$. Переходя к безразмерному кондактансу $g_L(\omega) = h\nu_F D_L(\omega) L^{d-2}$, и проводя описанные в работе [2] преобразования, получим

$$\begin{gathered} g_L = \frac{p}{z^2} + H_T(z), \\ \pm c_d \left(\frac{L}{\xi}\right)^{d-2} = \frac{p}{z^2} + H(z), \\ p = \frac{-i\omega+\gamma}{\Delta}, \quad z = \frac{L}{\xi_{0D}}, \end{gathered} \tag{51}$$

где добавлено неупругое затухание γ. Теперь величина ξ_{0D} зависит от ω и ее модуль (при $\gamma = 0$) обычно обозначается L_ω. Исключая p, получим скейлинг для динамической проводимости,

$$g_L(\omega) = F(L/\xi, L/L_\omega),$$

обсуждавшийся Шапиро и Абрахамсом [29, 30]. Уравнения (51) переходят в (45) при условии $|-i\omega+\gamma| \ll \Delta$, тогда как более актуальным является противоположный случай.

При $|p| \gg 1$ основной интерес представляет область больших z, где для $H(z)$ справедлива вторая асимптотика (46), а величина $H_T(z)$ экспоненциально мала:

$$g_L = \frac{p}{z^2}, \quad \pm c_d \left(\frac{L}{\xi}\right)^{d-2} = \frac{p}{z^2} - c_d z^{d-2}. \tag{52}$$

Локализованный режим имеет место при $z \gg |p|^{1/d}$, когда

$$\xi_{0D}(\omega) = \xi_{0D}(0), \quad g_L(\omega) = \frac{-i\omega+\gamma}{\Delta} g_L(0), \tag{53}$$

и частотная зависимость ξ_{0D} отсутствует, поэтому переход от (36) к (39) в разд. 4 является обоснованным; величины $\xi_{0D}(0)$ и $g_L(0)$ определяются уравнением (52) с $p = 1$. В области $z \ll |p|^{1/d}$ реализуется металлический режим:

$$\begin{gathered} \xi_{0D}(\omega) = \left(\frac{-i\omega+\gamma}{\Delta}\right)^{-1/2} \xi_{0D}(0), \\ g_L(\omega) = g_L(0), \end{gathered} \tag{54}$$

в котором коэффициент диффузии D не зависит от частоты и правильным является вычисление Альтшулера–Шкловского, приводящее к (32) с заменой D_0 на D. В критической точке зависимость от ω имеют обе величины,

$$\begin{gathered} \xi_{0D}(\omega) \sim (-i\omega+\gamma)^{-1/d}, \\ g_L(\omega) \sim (-i\omega+\gamma)^{(d-2)/d}, \end{gathered} \tag{55}$$

так что ни (39), ни (32) не являются правильными.

Подставляя выражения (53)–(55) в (36) и используя для $F(x)$ вторую асимптотику (38), можно все три результата записать в единой форме:

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{k_\sigma \tilde{c}_d}{\pi^2 L^{2d}} \operatorname{Re} \frac{1}{(-i\omega+\gamma)^2} \times \left(\frac{-i\omega+\gamma}{\Delta}\right)^\beta \left[\frac{L}{\xi_{0D}(0)}\right]^d, \tag{56}$$

где показатель β принимает значения 0, 1 и $d/2$ соответственно в диэлектрической фазе, в критической точке и в металлическом состоянии. Выражение (56) можно рассматривать как интерполяционную формулу, описывающую всю область параметров, если принять, что β медленно меняется при изменении расстояния до перехода. Подставляя (56) в (19) и интегрируя, имеем

$$\sigma_0^2 = \frac{2k_\sigma \tilde{c}_d}{\pi^2} \operatorname{Re} \frac{(\gamma + iE)^\beta - \gamma^\beta}{\beta(1-\beta)\Delta^\beta} \left[\frac{L}{\xi_{0D}(0)}\right]^d. \tag{57}$$

При $E \gtrsim \gamma$ главным является член $\operatorname{Re}(\gamma + iE)^\beta \sim \sim (\gamma^2 + E^2)^{\beta/2}$, и по порядку величины тот же результат получается из выражения[8)]

$$K(\epsilon_1, \epsilon_2) = \frac{k_\sigma \tilde{c}_d}{\pi^2 L^{2d}} \operatorname{Re} \frac{1}{(-i\omega + \gamma)^2} \times \\ \times \left(\frac{\gamma^2 + E^2}{\Delta^2}\right)^{\beta/2} \left[\frac{L}{\xi_{0D}(0)}\right]^d. \tag{58}$$

Поэтому формально можно пользоваться выражением (36) с ξ_{0D}, не зависящим от ω, если в (52) заменить $-i\omega + \gamma$ на величину порядка $(\gamma^2 + E^2)^{1/2}$; поскольку $\gamma \sim \gamma_{min}$, то это и обосновывает представление (42) для эффективного затухания.

В результате второе уравнение (52) принимает вид

$$\pm c_d \left(\frac{L}{\xi}\right)^{d-2} = \frac{s(k_1 + u)^{1/2}}{z^2} - c_d z^{d-2}, \quad z = \frac{L}{\xi_{0D}} \tag{59}$$

и вместе с (44) определяет зависимость σ_0^2 от L/ξ в параметрической форме. В критической области $u \sim 1$ и, следовательно, $\gamma_{min} \sim E$.

6. ТРЕХМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

6.1. Скейлинг для σ_0^2

При больших s актуальны большие z, что позволяет использовать для $F(1/z)$ вторую асимптотику (38). Делая замену $u \to k_1 u$ и исключая z, приведем выражения (44), (59) к виду

$$\frac{\sigma_0^2}{\sigma_P^2} = k_1 u \ln \frac{1 + k_1 + k_1 u}{k_1 + k_1 u}, \\ \pm \left(\frac{L}{s^{1/d}\xi}\right)^{d-2} = \frac{(1+u)^{1/2} - Bu}{u^{2/d}}, \tag{60}$$

[8)] Условие $E \gtrsim \gamma$ нарушается в локализованной фазе, но в этом случае зависимость от величины p отсутствует и используемое для нее приближение не имеет значения.

где мы изменили общий масштаб ξ, чтобы иметь единичный коэффициент в левой части второго уравнения; параметр $B = \pi^2 c_d k_1^{1/2}/k_\sigma \tilde{c}_d$. Уравнения (60) справедливы для размерностей $2 < d < 4$ и в параметрической форме определяют скейлинг

$$\frac{\sigma_0^2}{\sigma_P^2} = F_\sigma \left(\frac{L}{s^{1/d}\xi}\right), \tag{61}$$

согласно которому величины L/ξ и s входят лишь в определенной комбинации. Именно такой скейлинг обнаружен в численных экспериментах [11].

Параметры k_1 и k_σ можно выбрать так, чтобы воспроизвести правильные результаты в металлической фазе и в критической точке. Замечая, что масштаб L_E совпадает с ξ_{0D} при $p = s$, имеем $\xi_{0D} = = k_1^{-1/4} L_E$ из уравнения (59) в области малых z; тогда (44) дает

$$\sigma_0^2 = \frac{k_\sigma \tilde{c}_d}{\pi^2} k_1^{d/4} \ln \frac{1 + k_1}{k_1} \left(\frac{L}{L_E}\right)^d, \tag{62}$$

что нужно отождествить с результатом (32) Альтшулера–Шкловского: это дает связь k_1 и k_σ. В критической точке, определяемой условием $Bu_c = = (1 + u_c)^{1/2}$, первое уравнение (60) должно давать $\sigma_0^2/\sigma_P^2 = \kappa_0$. Рассматривая все параметры как функции k_1, имеем

$$k_\sigma = A_d \left[k_1^{d/4} \ln \frac{1 + k_1}{k_1}\right]^{-1}, \quad B = \frac{2\pi^2 k_1^{1/2}}{(d-2)k_\sigma}, \\ u_c = \frac{1 + (1 + 4B^2)^{1/2}}{2B^2}, \\ \kappa_0 = k_1 u_c \ln \frac{1/k_1 + 1 + u_c}{1 + u_c}, \tag{63}$$

где

$$A_d = \frac{4\cos(\pi d/4)}{d(1 - d/2)}, \tag{64}$$

что позволяет изменением k_1 подобрать правильное значение κ_0. Актуальный выбор параметров для трехмерного случая соответствует значению $\kappa_0 = = 0.28$ [11]:

$$k_1 = 0.0346, \quad k_\sigma = 6.92, \\ B = 0.531, \quad u_c = 4.36. \tag{65}$$

Вычисленная зависимость $y = F_\sigma(x)$ представлена на рис. 6*а*, а ее сопоставление с численными результатами работы [11] дано на рис. 6*б*.

6.2. Скейлинг для σ^2 и A

В разд. 2 мы установили, что величины σ^2 и σ_0^2 совпадают по порядку величины. Скейлинговые

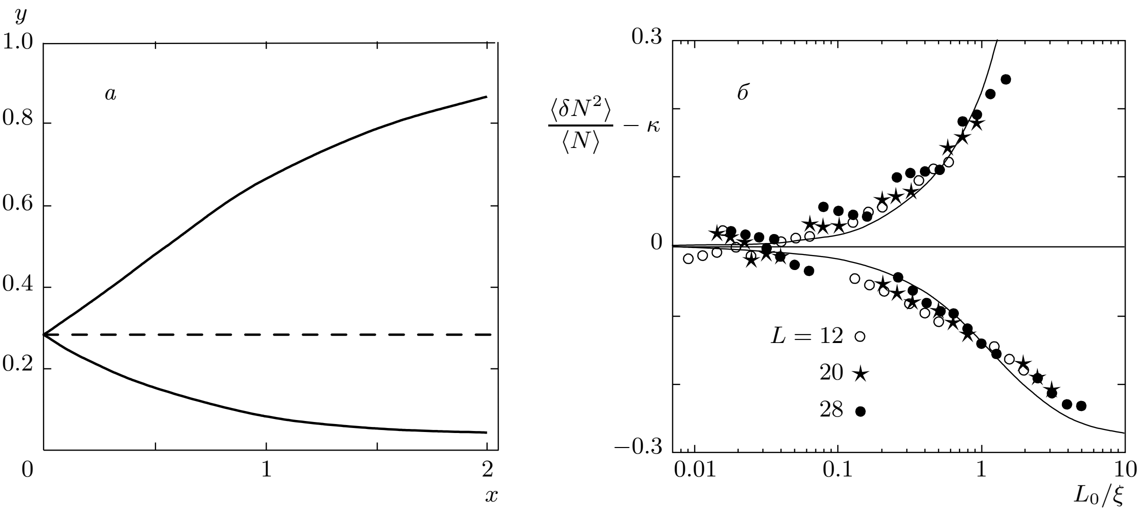

Рис. 6. Теоретическая зависимость $y = \sigma_0^2/\sigma_P^2$ от $x = L/\xi s^{1/d}$ (*а*) и ее сопоставление с численными результатами работы [11] (*б*), где использовалось обозначение $L_0 = Ls^{-1/3}$

уравнения (60) для них одинаковы, но различаются выбором параметров. Поскольку для σ^2 пуассоновское значение равно $s/2$ (см. (12)), нужно выбрать $k_2 = 2k_\sigma s/\pi^2$, что в два раза уменьшает параметр B. Принимая для σ^2 такое же поведение в металлической фазе, как для σ_0^2, вместо (63) получим

$$k_\sigma = A_d \left[k_1^{d/4} \ln \frac{1+k_1}{k_1}\right]^{-1}, \quad B = \frac{\pi^2 k_1^{1/2}}{(d-2)k_\sigma},$$
$$u_c = \frac{1+(1+4B^2)^{1/2}}{2B^2}, \tag{66}$$
$$\kappa = \frac{1}{2} k_1 u_c \ln \frac{1/k_1 + 1 + u_c}{1+u_c},$$

что позволяет выбрать k_1 по критическому значению $A_c = 1/2\kappa = 1.9$ [12] скейлинговой переменной A (см. (17)), после чего для остальных параметров имеем

$$k_1 = 0.0366, \quad k_\sigma = 6.74,$$
$$B = 0.280, \quad u_c = 13.67. \tag{67}$$

Ввиду соотношения (17), параметр A является величиной, обратной к σ^2/σ_P^2, и его скейлинг тривиальным образом определяется уравнениями (60). Его сопоставление с данными Жарекешева и Крамера [12] представлено на рис. 7.

6.3. Скейлинг для $\alpha(s_0)$

Скейлинговый параметр $\alpha(s_0)$ также определяется комбинацией σ^2/σ_P^2, что ясно из выражения (16).

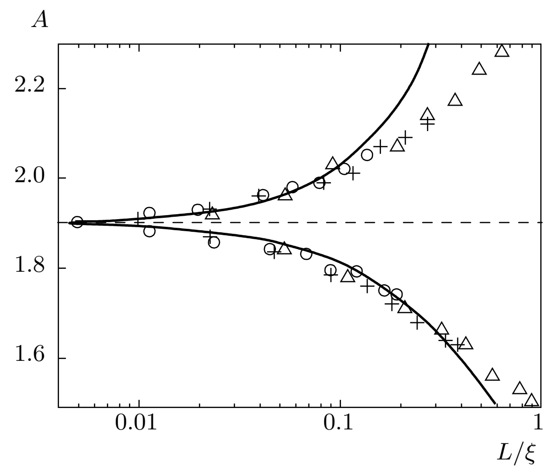

Рис. 7. Численные данные Жарекешева и Крамера [12] (символы) для скейлингового параметра $A = \sigma_P^2/\sigma^2$ и их сопоставление с теоретической зависимостью (сплошные линии)

Последнее справедливо при $s_0 \gg 1$, и его экстраполяция к значениям порядка единицы не может быть надежной; поэтому в качестве s_0 надо выбирать некоторое эффективное значение s_{eff}.

Далее нужно иметь в виду, что при конечных s величина σ^2/σ_P^2 не стремится к нулю в металлической фазе. Конечность s можно учесть, если принять для функции $F(x)$ в (37) интерполяционную формулу

$$F(1/x) = 1 + \tilde{c}_d x^d,$$

обеспечивающую правильные асимптотики (38); ее подстановка в (44) и (59) приведет к изменению второго уравнения (60):

$$\pm\left(\frac{L}{s^{1/d}\xi}\right)^{d-2} = \frac{(1+u)^{1/2} - B(u-u_0)}{(u-u_0)^{2/d}}, \qquad (60')$$

где $u_0 \sim 1/s$. Тогда в металлической фазе $u \to u_0$ при $L \to \infty$ и отношение σ^2/σ_P^2 стремится к постоянному значению. Если параметры для σ^2 выбраны в соответствии с разд. 6.2, то выбором s_{eff} и u_0 можно обеспечить правильные значения α в критической точке и металлической области.

Скейлинг для $\alpha(s_0)$ изучался при $s_0 = 2$ в работе [10] и при $s_0 = 0.473$ в работе [11]. Эти результаты согласуются с теоретической зависимостью при выборе $s_{eff} = 2.22$, $u_0 = 8.67$ в первом случае (любопытно, что значение s_{eff} близко к s_0) и $s_{eff} = 2.99$, $u_0 = 10.2$ во втором (рис. 8). Небольшой сдвиг вдоль горизонтальной оси на рис. 8*a* соответствует добавлению к L положительной величины L_0, что объясняется поправками к скейлингу (см. разд. 6.4). Заметим, что конечность u_0 практически не влияет на результаты за пределами металлической области.

6.4. Критическое поведение и поправки к скейлингу

Простейший способ извлекать критическое поведение из скейлинговых соотношений типа (7) основан на том, чтобы переписать их в виде (τ — расстояние до перехода)

$$\alpha = F\left(\frac{L^{1/\nu}}{\xi^{1/\nu}}\right) = F\left(\tau L^{1/\nu}\right) = \alpha_c + C\tau L^{1/\nu} + \ldots \qquad (68)$$

и регулярным образом разложить по τ, что возможно ввиду отсутствия фазового перехода в конечных системах. Тогда производная по τ ведет себя как $L^{1/\nu}$ и непосредственно определяет критический индекс ν корреляционного радиуса ξ.

Такая процедура безусловно правильна, если соотношение (7) является точным. Однако точным оно не является ввиду существования поправок к скейлингу. Для рассмотрения последних вернемся к предложенному в работе [2] разбиению для суммы по $\mathbf{q}$ в (49):

$$\frac{1}{L^d}\frac{1}{m^2} + \frac{1}{L^d}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ |\mathbf{q}|<\Lambda}}\left(\frac{1}{m^2+q^2} - \frac{1}{q^2}\right) + \frac{1}{L^d}\sum_{\substack{\mathbf{q}\neq 0\\ |\mathbf{q}|<\Lambda}}\frac{1}{q^2} \equiv I_1(m) + I_2(m) + I_3(0), \qquad (69)$$

где мы выделили член с $\mathbf{q} = 0$, а к оставшейся сумме добавили и вычли такую же сумму с $m = 0$. Во втором члене $I_2(m)$ можно положить $\mathbf{q} = 2\pi\mathbf{s}/L$, после чего он представляется в виде

$$I_2(m) = L^{2-d}H_0(mL) + O(m^2\Lambda^{d-4}), \qquad (70)$$

где первый член соответствует пределу $\Lambda \to \infty$ ($H_0(z)$ — некоторая функция), а второй определяет поправку, связанную с конечностью Λ. Третий член в (69) может быть оценен путем перехода от суммирования к интегрированию с ограничением $|q| \gtrsim 1/L$:

$$I_3(0) = \Lambda^{d-2}\left[b_0 + b_1\left(\frac{a}{L}\right)^{d-2}\right]. \qquad (71)$$

Тогда, полагая $\tau = \mathcal{E}^2/W^2 - b_0\Lambda^{d-2}$, для отклонения $y = \xi_{0D}/L$ от критического значения получим

$$\frac{\xi_{0D}}{L} - y_c = C\left(\frac{L}{a}\right)^{d-2} \times \left[\tau + O\left(\frac{a^2}{\xi_{0D}^2}\right)\right] + O\left(\frac{a}{L}\right). \qquad (72)$$

Дифференцируя по τ и исключая $(\xi_{0D})'_\tau$ из правой части итерационным образом, имеем

$$\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right)'_\tau = C_0L^{d-2} + C_1L^{2d-6}. \qquad (73)$$

В трехмерном случае главная поправка к скейлингу сводится к константе, так что при малых τ

$$\frac{\xi_{0D}}{L} - y_c = C_0\tau\,(L + L_0) \qquad (74)$$

с точностью до членов, исчезающих при $L \to \infty$. Поскольку все скейлинговые параметры являются регулярными функциями ξ_{0D}/L, их отклонения от критических значений ведут себя таким же образом.

Результат (74) получен в работе [1] для другого скейлингового параметра, а его универсальность мотивировалась соображениями, основанными на вильсоновской ренормгруппе. Поскольку результаты для L, меньших некоторого значения L_{min},

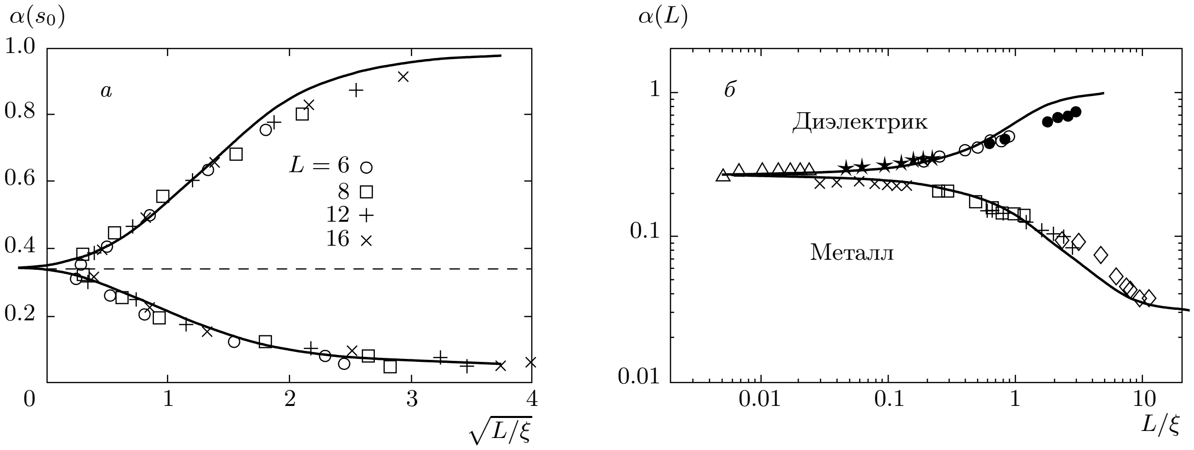

Рис. 8. Сопоставление зависимости $\alpha(s_0)$ от L/ξ с результатами работ [10] (a) и [11] ($б$). Использовались значения $s_{eff} = 2.22$, $u_0 = 8.67$ в первом случае и $s_{eff} = 2.99$, $u_0 = 10.2$ во втором

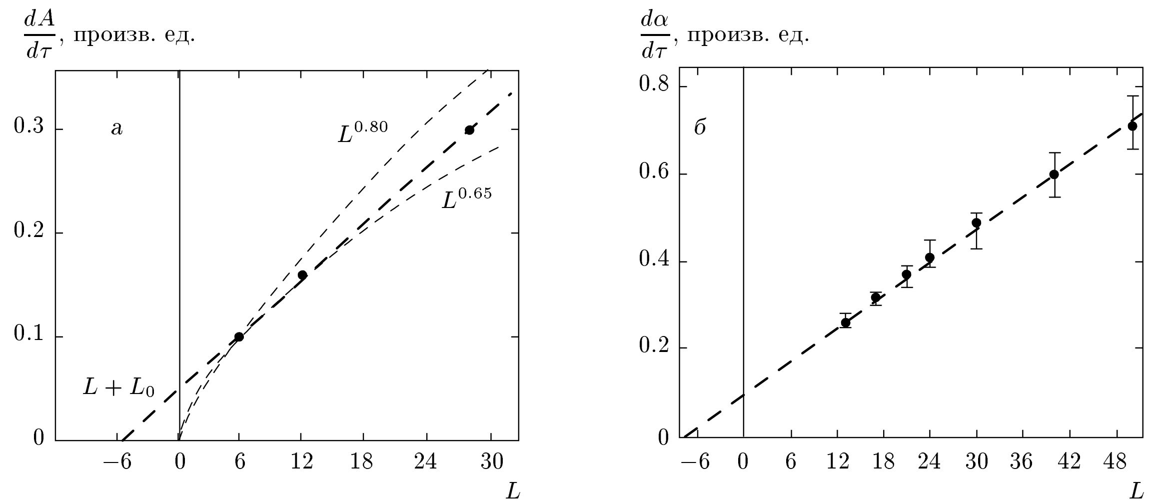

Рис. 9. Обработка по закону $L + L_0$ (крупные штрихи) для численных данных, основанных на исследовании статистики уровней. a) Данные из работы [12]; точки — средние значения производной скейлингового параметра A, определенные по рис. 4 в [12] в интервале $16 < W < 17$. Статистическая ошибка, связанная с каждой точкой, может оцениваться очень консервативно (см. таблицу в [31]) ввиду нерегулярности кривых, приведенных на указанном рисунке; неопределенность, допускаемая самими авторами, соответствует зазору между зависимостями $L^{0.80}$ и $L^{0.65}$, определяющими верхнюю и нижнюю границы результата для критического индекса, $\nu = 1.40 \pm 0.15$. $б$) Данные, полученные в работе [15]; точки соответствуют производной скейлингового параметра α, определенной по наклону сплошных кривых на вставке к рис. 3 в [15], а их неопределенность соответствует вариации угла наклона в пределах размера экспериментальных точек

всегда выпадают из скейлинговой картины и правомерно отбрасываются исследователями, зависимость $L+L_0$ с $L_0 > 0$ может интерпретироваться как $L^{1/\nu}$ с $\nu > 1$. Такая неоднозначность обработки продемонстрирована в работах [1, 3] на множестве примеров. Результаты, относящиеся к статистике уровней, иллюстрируются на рис. 9.

7. ДВУМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ

Согласно работе [2], в двумерном случае происходит замена степенной функции во втором уравнении (51) на логарифмическую,

$$-c_2 \ln\left(\frac{L}{\xi}\right) = \frac{p}{z^2} + H(z), \quad c_2 = \frac{1}{2\pi}, \tag{75}$$

где для больших p можно ограничиться асимптотикой $H(z) = -c_2 \ln z$. Полагая, как и выше, $p = \left[k_1 s^2 + k_2 F(1/z)\right]^{1/2}$, выбирая $k_2 = 2k_\sigma s/\pi^2$ в соответствии с пуассоновским условием для σ^2 (см. разд. 6.2) и исключая z, вместо второго уравнения (60) имеем

$$-\ln\left(\frac{L}{s^{1/2}\xi}\right) = B\frac{\sqrt{1+u}}{u-u_0} - \ln\sqrt{u-u_0}, \qquad (76)$$

где $u_0 \sim 1/s$ учитывает конечность s (аналогично разд. 6.3),

$$B = \frac{k_\sigma}{\pi^2 k_1^{1/2}} = \left[\pi k_1 \ln\frac{1+k_1}{k_1}\right]^{-1} \qquad (77)$$

и использована связь k_σ с k_1, определяемая соответствием с результатом (32). Параметр k_1 остается свободным и может использоваться в качестве подгоночного. Нетрудно видеть, что при больших s по-прежнему справедлив скейлинг (61).

В двумерном случае использовался более сложный скейлинговый параметр [13]

$$\gamma(s_0) = \frac{1}{\mathcal{N}}\int\limits_0^{s_0}\left[\tilde I(s) - \tilde I_P(s)\right] ds = \\ = \frac{1}{\mathcal{N}}\int\limits_{s_0}^{\infty}\left[I(s) - I_P(s)\right] ds, \qquad (78)$$

где нормировочный множитель $\mathcal{N}$ выбирается из условия $\gamma(s_0) = 1$ при $I(s) = I_W(s)$. Второе соотношение следует из первого ввиду того, что $I(s) = 1 - \tilde I(s)$, и из нормированности $I(s)$:

$$\int\limits_0^\infty I(s)\, ds = \int\limits_0^\infty sP(s)\, ds = \langle s\rangle = 1. \qquad (79)$$

При больших s_0 второй интеграл в (78) можно оценить, полагая $I(s) \sim \exp\{-s\sigma_P^2/\sigma^2\}$ (см. (11)) и считая отношение σ_P^2/σ^2 почти постоянным:

$$\gamma(s_0) = 1 - \sigma^2/\sigma_P^2 \exp\left\{-s_0\frac{\sigma_P^2 - \sigma^2}{\sigma^2}\right\}, \qquad (80)$$

так что $\gamma(s_0)$ определяется величиной σ^2/σ_P^2.

В работе [13] при больших значениях L/ξ эмпирически установлено соотношение

$$\gamma(s_0) \sim 1 - \sigma^2/\sigma_P^2 \sim \xi/L, \qquad (81)$$

которое не имеет места в настоящей теории: из (76) и (60) ясно, что $\gamma(s_0) \sim 1/u$, $u \sim (L/\xi)^2$ и вместо (81) реализуется поведение $(\xi/L)^2$. Однако практически

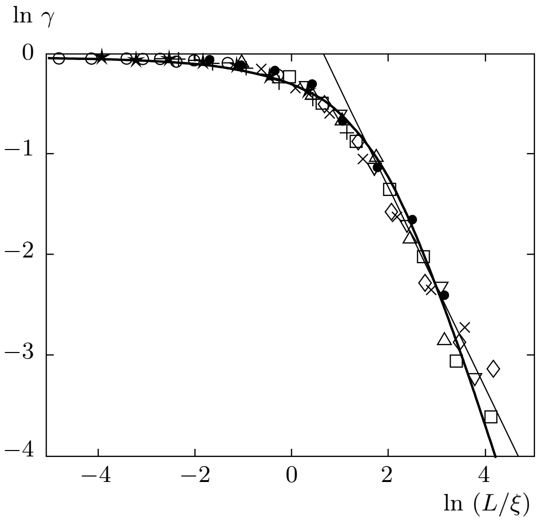

Рис. 10. Численные данные работы [13] для зависимости $\gamma(s_0)$ от L/ξ в двумерном случае и ее сопоставление с теоретической зависимостью при $k_1 = 0.002$ и $u_0 = 44$; в обоих случаях использовалось значение $s_0 = 1.25$. Тонкая прямая линия соответствует закону (81)

такой закон возникает при экспоненциально больших значениях L/ξ, а численные данные вполне удовлетворительно подгоняются при выборе $k_1 = 0.002$ (рис. 10) (малое значение k_1 не удивительно, так как оно оказывалось малым и в трехмерном случае). Причина этого в том, что при малых k_1 актуальны большие значения u и $x = L/\xi s^{1/2}$, для которых правая и левая части выражения (76) меняются медленно и могут быть линеаризованы вблизи некоторых точек u_c и x_c. Произвольность выбора общего масштаба ξ позволяет компенсировать нулевой член в линейной зависимости и обеспечить пропорциональность величин u и L/ξ в достаточно широкой области. Таким образом, зависимость (81) действительно справедлива как промежуточная асимптотика.

8. ВЫСШИЕ РАЗМЕРНОСТИ

8.1. Размерности $d > 4$

При $d > 4$ для величины $I_2(m)$ в (69) имеем

$$I_2(m) = -c_d m^2 \Lambda^{d-4}, \quad c_d = K_d/(d-4) \qquad (82)$$

и вместо второго уравнения (52) получим

$$\pm c_d\left(\frac{L}{\xi}\right)^2\left(\frac{L}{a}\right)^{d-4} = \frac{p}{z^2} - c_d z^2\left(\frac{L}{a}\right)^{d-4}. \qquad (83)$$

Удобно ввести переменные

$$y = \frac{L}{\xi_{0D}}\left(\frac{L}{a}\right)^{(d-4)/4}, \quad x = \frac{L}{\xi}\left(\frac{L}{a}\right)^{(d-4)/4}, \qquad (84)$$

в которых уравнение (83) принимает вид

$$\pm c_d x^2 = \frac{p}{y^2} - c_d y^2. \qquad (85)$$

Полагая по-прежнему $p^2 = k_1 s^2 + k_2 F(1/z)$ и выбирая $k_2 = 2k_\sigma s/\pi^2$ из пуассоновского значения для величины σ^2 (см. разд. 6.2), имеем

$$\begin{gathered} \pm c_d x^2 = \frac{s k_1^{1/2}(1+u)^{1/2}}{y^2} - c_d y^2, \\ u = \frac{2k_\sigma}{\pi^2 k_1 s} F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right), \end{gathered} \qquad (86)$$

где функция $F(x)$ по-прежнему определяется формулой (37), но имеет другое поведение в актуальной области малых x:

$$F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right) = c_d\left(\frac{L}{\xi_{0D}}\right)^4\left(\frac{L}{a}\right)^{d-4} = c_d y^4. \qquad (87)$$

Используя (87) и исключая y, вместо (60) окончательно имеем

$$\begin{gathered} \frac{\sigma_0^2}{\sigma_P^2} = k_1 u \ln\frac{1+k_1+k_1 u}{k_1+k_1 u}, \\ \pm\frac{x^2}{s^{1/2}} = \frac{(1+u)^{1/2} - Bu}{u^{1/2}}, \end{gathered} \qquad (88)$$

где $B = \pi^2 k_1^{1/2}/2k_\sigma$. В металлической фазе уравнения (88) дают

$$\sigma^2 = \frac{k_1 k_\sigma c_d}{\pi^2}\left(\frac{L}{L_E}\right)^4\left(\frac{L}{a}\right)^{d-4}\ln\frac{1+k_1}{k_1}, \qquad (89)$$

что нужно отождествить с результатом для режима Альтшулера – Шкловского

$$\sigma^2 = \frac{c_d}{\pi^2}\left(\frac{L}{L_E}\right)^4\left(\frac{L}{a}\right)^{d-4}, \qquad (90)$$

который следует из выражения (31), но имеет форму, отличную от (32). Для выбора параметров получаем соотношения

$$k_\sigma = \left[k_1 \ln\frac{1+k_1}{k_1}\right]^{-1}, \quad B = \frac{\pi^2 k_1^{1/2}}{2k_\sigma} \qquad (91)$$

и т. д., совпадающие с (66) для $d = 4$.

Уравнения (88) определяют в параметрической форме скейлинговую зависимость

$$\frac{\sigma^2}{\sigma_P^2} = F_\sigma\left(\frac{x}{s^{1/4}}\right), \quad x = \frac{L}{\xi}\left(\frac{L}{a}\right)^{(d-4)/4}, \qquad (92)$$

которая отлична от (61) и содержит атомный масштаб a. Зависимость от $x \propto L^{d/4}$ вместо L сводится к изменению масштаба в логарифмических координатах, поэтому скейлинговые кривые строятся в точности так же, как в трехмерном случае; однако их интерпретация должна быть другой и соответствовать соотношению (92).

Заметим, что в высших размерностях общая форма скейлинговой зависимости имеет вид

$$\frac{\sigma^2}{\sigma_P^2} = F\left(\frac{L}{\xi}, \frac{L}{a}\right),$$

так как атомный масштаб a не может быть исключен из результатов ввиду неперенормируемости теории [26]. В критической точке аргумент L/ξ обращается в нуль, но зависимость от L/a в общем случае сохраняется. По этой причине скейлинговые параметры стандартных алгоритмов обычно не остаются постоянными в критической точке [1, 2]. Отсутствие такой зависимости для величины σ^2/σ_P^2 (очевидное из (92)) является нетривиальным результатом теории и согласуется с существованием стационарного распределения уровней, установленного в численных экспериментах [14]. Заметим, что в [18] существование «спектральной жесткости» κ_0 связывалось с постоянством кондактанса g_L в критической точке; при $d > 4$ спектральная жесткость сохраняется, несмотря на то, что постоянство g_L уже не имеет места [2].

8.2. Четырехмерный случай

В четырехмерном случае для величины $I_2(m)$ имеем

$$I_2(m) = -c_4 m^2 \ln\frac{\Lambda}{m} + O\left(\frac{m^4}{\Lambda^2}\right), \quad c_4 = K_4 \qquad (93)$$

и вместо (83) получим уравнение

$$\pm c_4\left(\frac{L}{\xi}\right)^2 \ln\frac{\xi}{a} = \frac{p}{z^2} - c_4 z^2 \ln\frac{\xi_{0D}}{a}, \quad z = \frac{L}{\xi_{0D}}, \qquad (94)$$

которое в переменных

$$y = \frac{L}{\xi_{0D}}\left(\ln\frac{L}{a}\right)^{1/4}, \quad x = \frac{L}{\xi}\frac{[\ln(\xi/a)]^{1/2}}{[\ln(L/a)]^{1/4}}, \qquad (95)$$

примет вид, совпадающий с (83). Аналогично предыдущему получим (86), где функция $F(x)$ при малых x ведет себя как

$$F\left(\frac{\xi_{0D}}{L}\right) = c_4\left(\frac{L}{\xi_{0D}}\right)^4 \ln\left(\frac{\xi_{0D}}{a}\right) \approx c_4 y^4, \qquad (96)$$

поскольку в критической области $L \sim \xi_{0D} \gg a$. В результате придем к уравнениям (88) с другим определением x и скейлингу

$$\frac{\sigma^2}{\sigma_P^2} = F_\sigma\left(\frac{x}{s^{1/4}}\right), \quad x = \frac{L}{\xi}\frac{[\ln(\xi/a)]^{1/2}}{[\ln(L/a)]^{1/4}}. \tag{97}$$

Возможны обычные скейлинговые построения, если величину σ^2/σ_P^2 рассматривать как функцию модифицированной длины $\mu(L) = L[\ln(L/a)]^{-1/4}$.

В металлической фазе уравнения (88) дают

$$\sigma^2 = \frac{k_1 k_\sigma c_4}{\pi^2}\ln\frac{1+k_1}{k_1}\left(\frac{L}{L_E}\right)^4 \ln\left(\frac{L_E}{a}\right), \tag{98}$$

тогда как в режиме Альтшулера–Шкловского

$$\sigma^2 = \frac{c_4}{\pi^2}\left(\frac{L}{L_E}\right)^4 \ln\left(\frac{L_E}{a}\right), \tag{99}$$

поэтому для выбора параметров получим прежние соотношения (91). Актуальный выбор параметров соответствует значению $A_c = 1/2\kappa = 1.4$ [14]:

$$\begin{gathered} k_1 = 0.0652, \quad k_\sigma = 5.49, \\ B = 0.230, \quad u_c = 19.9. \end{gathered} \tag{100}$$

Главная поправка к скейлингу определяется членом $O(m^4/\Lambda^2)$ в (93), с учетом которого второе уравнение (88) при $s = 1$ дает

$$b(u - u_c) = \frac{(L/a)^2[\tau + c_4 a^4/2\xi_{0D}^4]}{[\ln(\xi_{0D}/a)]^{1/2}}, \tag{101}$$

где мы линеаризовали правую часть уравнения (88) вблизи критической точки. Находя производную u'_τ итерационным способом, для малых τ получим

$$u = u_c + \frac{\tau}{b}\left[\frac{(L/a)^2}{[\ln(L/a)]^{1/2}} + \frac{G}{[\ln(L/a)]^2}\right], \tag{102}$$

где

$$G = \frac{\pi^2 k_1}{4bk_\sigma} = 4k_\sigma^{1/2} = 9.35. \tag{103}$$

В четырехмерном случае в качестве скейлингового параметра использовалась величина [14]

$$J_0 = \frac{1}{2}\langle s^2\rangle = \frac{1}{2}\int\limits_0^\infty s^2 P(s)\,ds = \int\limits_0^\infty sI(s)\,ds. \tag{104}$$

Ее можно оценить, полагая $I(s) \sim \exp(-sA)$ с почти постоянной величиной A и учитывая нормированность $I(s)$ на единицу (см. (79)):

$$J_0 \approx \left.\frac{\sigma^2}{\sigma_P^2}\right|_{s\sim 1}. \tag{105}$$

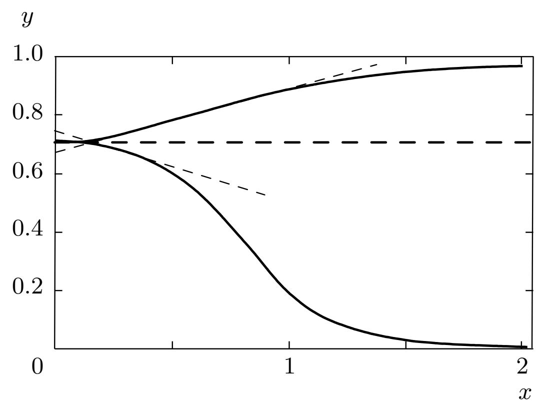

Рис. 11. Вычисленная зависимость $y = \sigma^2/\sigma_P^2$ от x. Отчетливо виден линейный участок в интервале $0.2 < x < 1$

Разумеется, такая оценка является довольно грубой, так как интеграл набирается от области $s \sim 1$, где предположение о постоянстве A неудовлетворительно. Более правильно считать, что J_0 является регулярной функцией σ^2/σ_P^2 (при некотором $s \sim 1$), так что их отклонения от критических значений пропорциональны друг другу:

$$J_0 - J_{0c} = \text{const}\left(\frac{\sigma^2}{\sigma_P^2} - 2\kappa\right). \tag{106}$$

Вычисленная зависимость $y = \sigma^2/\sigma_P^2$ от x приведена на рис. 11. При учете конечности s величина y в металлической фазе приобретет значение порядка единицы, и две ветви зависимости окажутся приблизительно симметричными. С этой точки зрения поведение верхней ветви является более характерным. Для нее на рис. 11 можно выделить три области: 1) область $x < 0.2$, где $y - y_c \sim x^2$, соответствующая критическому поведению; 2) область $0.2 < x < 1$, где зависимость почти линейна; 3) область насыщения $x > 1$. Первая область соответствует очень малым значениям $y - y_c$, которые практически недостижимы для численных экспериментов ввиду их ограниченной точности[9]. Поэтому наблюдаемые зависимости (рис. 12) близки к линейному закону $y - y_c = c_1 + c_2 x$, а малость c_1 позволяет их интерпретировать как $L^{1/\nu}$ с $\nu \approx 1$ [14]. Соотношение c_1 и c_2 отличается от такового в теоретической зависимости (см. рис. 11), что может быть связано с поправками к скейлингу. Последние (см. выражение (102)) приводят к тому, что к главной зависимости $(L/a)^2$ добавляется медленно меняющаяся (по-

[9] Узкая критическая область обычно связана с существованием малых параметров типа числа Гинзбурга.

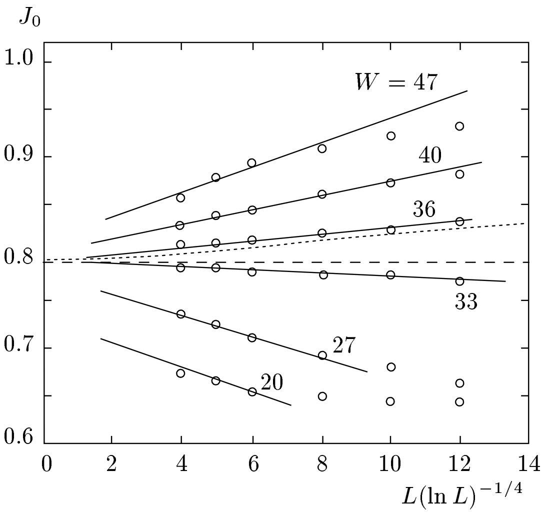

Рис. 12. Численные данные для J_0, извлеченные из рис. 4 работы [14], как функция модифицированной длины $\mu(L) = L(\ln L)^{-1/4}$ и их обработка по линейному закону. Пунктиром показана теоретическая зависимость, масштаб которой выбран из соответствия с наклоном линейной зависимости для $W = 36$; для достижения согласия требуется постоянный сдвиг вверх на величину порядка значения $J_0 - J_{0c}$ при $L = 4$

чти постоянная) функция, которая становится существенной при $L/a \approx 3$. Примерно такой постоянный сдвиг требуется для восстановления правильного соотношения c_1 и c_2 (рис. 12).

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предполагая справедливость самосогласованной теории локализации Вольхардта–Вольфле, мы вывели соотношения конечно-размерного скейлинга для различных параметров, характеризующих статистику уровней. Сопоставление с обширным численным материалом показывает, что на уровне первичных данных результаты численных экспериментов вполне совместимы с самосогласованной теорией, а противоположные утверждения оригинальных работ связаны с неоднозначностью интерпретации и наличием малых параметров типа числа Гинзбурга.

Небольшие расхождения, имеющиеся на некоторых рисунках, могут быть связаны с разными причинами.

1) Построение скейлинговых кривых связано с некоторым произволом (см. обсуждение в работе [1]). Вся скейлинговая кривая никогда не возникает в одном эксперименте, а «измеряется по кусочкам». Нетрудно видеть (см. рис. 6–8, 10), что качество подгонки можно существенно улучшить, если подгонять не всю кривую, а ее отдельные части.

2) Наличие поправок к скейлингу (см. разд. 6.4, 8.2) приводит к систематическим искажениям эмпирических скейлинговых кривых.

3) Введенные в настоящей работе параметры k_1, k_2, k_σ в действительности являются медленно меняющимися функциями, и их замена на константы является необходимым огрублением в связи с отсутствием информации об этих функциях.

4) В некоторых случаях результаты, полученные при $s_0 \gg 1$, экстраполируются в область $s_0 \sim 1$.

Таким образом, причины 1 и 2 имеют общий характер, а 3 и 4 специфичны для данной работы.

В целом мы считаем возможным говорить о выполнении некоторой «программы-минимум», состоящей в ликвидации неправдоподобно больших (и нарушающих общие принципы) расхождений между самосогласованной теорией и численным экспериментом. Что касается «программы-максимум» — проверки утверждения о том, что теория Вольхардта–Вольфле дает точное критическое поведение [7, 8], то это требует более тщательного анализа имеющихся небольших отклонений и проверки того, являются ли они значимыми. Такой анализ желательно проводить на основе первичных данных, а не для эмпирических скейлинговых кривых. Заметим, что в работах [1–3] и настоящей работе успешно описано около 20 зависимостей, относящихся к разным величинам и размерностям пространства от 2 до 5.

ЛИТЕРАТУРА

1. И. М. Суслов, ЖЭТФ **141**, 122 (2012).
2. И. М. Суслов, ЖЭТФ **142**, 1020 (2012).
3. И. М. Суслов, ЖЭТФ **142**, 1230 (2012).
4. P. Markos, Acta Phys. Slov. **56**, 561 (2006); arXiv:cond-mat/0609580.
5. D. Vollhardt and P. Wölfle, Phys. Rev. B **22**, 4666 (1980).
6. D. Vollhardt and P. Wölfle, Phys. Rev. Lett. **48**, 699 (1982).
7. H. Kunz and R. Souillard, J. de Phys. Lett. **44**, L506 (1983).
8. И. М. Суслов, ЖЭТФ **108**, 1686 (1995).
9. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантованных полей*, Наука, Москва (1976).

10. B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears et al., Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).

11. I. Kh. Zharekeshev and B. Kramer, NATO ASI Series E **291**, 93 (1995); И. Х. Жарекешев, Вестник Евразийского НУ **77**, 41 (2010).

12. I. Kh. Zharekeshev and B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **79**, 717 (1997).

13. I. Kh. Zharekeshev, M. Batsch, and B. Kramer, Europhys. Lett. **34**, 587 (1996).

14. I. Kh. Zharekeshev and B. Kramer, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 442 (1998).

15. F. Milde, R. A. Romer, and M. Schreiber, Phys. Rev. B **61**, 6028 (2000).

16. A. MacKinnon and B. Kramer, Phys. Rev. Lett. **47**, 1546 (1981); Z. Phys. **53**, 1 (1983).

17. K. Slevin and T. Ohtsuki, Phys. Rev. Lett. **82**, 382 (1999).

18. Б. Л. Альтшулер, И. Х. Жарекешев, С. А. Коточигова, Б. И. Шкловский, ЖЭТФ **94**, 343 (1988).

19. F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140, 157, 166 (1962).

20. Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике*, Наука, Москва (1977).

21. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishman, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

22. В. П. Чистяков, *Курс теории вероятностей*, Наука, Москва (1982).

23. Б. Л. Альтшулер, Б. И. Шкловский, ЖЭТФ **91**, 220 (1986).

24. Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский, Письма в ЖЭТФ **43**, 99 (1986).

25. Л. Б. Ефетов, ЖЭТФ **83**, 833 (1982).

26. И. М. Суслов, УФН **168**, 503 (1998).

27. И. М. Суслов, ЖЭТФ **127**, 1350 (2005).

28. Э. З. Кучинский, М. В. Садовский, ЖЭТФ **98**, 634 (1990).

29. B. Shapiro and E. Abrahams, Phys. Rev. B **24**, 4889 (1981).

30. B. Shapiro, Phys. Rev. B **25**, 4266 (1982).

31. I. M. Suslov, arXiv:cond-mat/0105325.