Локализация волн беспорядком.

А.С.Иоселевич

1 Введение: критерий локализации

Что такое локализованные состояния и что такое делокализованные состояния? Это не такой простой вопрос, как может показаться. К нему можно подходить с разных сторон. Здесь мы будем действовать следующим образом:

Пусть частица с энергией E в момент t находилась в точке $\mathbf{r}$. Предположим, что мы нашли вероятность $W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r})$ обнаружить ее в момент $t' > t$ в точке $\mathbf{r}'$. Зная ее, мы легко можем выяснить, является ли состояние с энергией E локализованным. Для этого посмотрим на асимптотику $W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r})$ при $t' - t \to \infty$, то есть на вероятность снова обнаружить частицу в той же самой точке по истечении очень большого времени. Если эта вероятность стремится к нулю, то это означает, что частица со временем уходит на бесконечность, то есть, состояние делокализовано. Если она остается конечной – состояние локализовано.

Как вычислять величину $W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r})$? На первый взгляд само ее определение находится в противоречии с квантовой механикой: если мы хотим узнать, что случилось с неким квантовым объектом через некоторое конечное время Δt, то энергия этого объекта не будет строго определена в соответствии с принципом неопределенности. Это, конечно, правильно, но, при больших Δt возникает только небольшая неопределенность в энергии $\Delta E \sim \hbar/\Delta t$ и поэтому при достаточно большом Δt (таком, что $\Delta t \cdot E/\hbar \gg 1$) уже можно говорить об одновременном (хотя и с некоторой погрешностью) измерении энергии и времени.

Совсем хорошо определенной величиной в квантовой механике является функция Грина (R – запаздывающая, A – опережающая)

$$G^{(R,A)}(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \mp i\theta(\pm\Delta t)\sum_\alpha \psi_\alpha(\mathbf{r}')\psi^*_\alpha(\mathbf{r})e^{\mp iE_\alpha \Delta t} \tag{1}$$

– амплитуда перехода между точками $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ за время Δt, либо – альтернативно – ее Фурье-образ,

$$G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r}')\psi^*_\alpha(\mathbf{r})}{E - E_\alpha \pm i0}, \quad G_E^{(A)}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \left[G_E^{(R)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')\right]^* \tag{2}$$

– амплитуда перехода между теми же точками для частицы с энергией E. Здесь $\psi_\alpha(\mathbf{r})$ и E_α, соответственно, собственные функции и собственные энергии гамильтониана задачи.

Как видим – либо одно, либо другое: либо время, либо энергия...

Как же тогда построить нужную нам величину? Правильный ответ:

$$W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r}) = AK_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}), \tag{3}$$

где

$$K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \int e^{iE\tau} d\tau G^{(R)}(\Delta t + \tau/2, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) G^{(A)}(\Delta t - \tau/2, \mathbf{r}|\mathbf{r}') =$$

$$= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} G^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) G^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}|\mathbf{r}'). \qquad (4)$$

Итак, вопрос решился следующим образом: Поскольку K – величина, билинейная по амплитуде перехода, в ней присутствуют две временные (или две энергетические) переменные. Нужная нам $K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})$ получается переходом (согласно формулам (9)) к смешанному (называемому также Вигнеровским) представлению, в котором одна переменная – временная, а другая – энергетическая. Можно убедиться (см. задачу 1), что в квазиклассическом случае величина (9) действительно ведет себя интуитивно ожидаемым образом, приближенно (с поправками, возникающими из-за квантовой неопределенности) описывая распространение классической частицы с энергией E.

Очевидно, вероятность $W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r})$ должна быть нормирована: $\int d\mathbf{r}' W_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r}) = 1$, поэтому нормировочная константа A находится из условия

$$A^{-1} = \int d\mathbf{r}' K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) \qquad (5)$$

В результате вычислений (см. задачу 2) получаем

$$A^{-1} = 2\mathrm{Im}\, G^{(R)}_E(\mathbf{r}|\mathbf{r}) \qquad (6)$$

Величину $K_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r})$ можно связать с “коррелятором плотность-плотность”

$$\tilde{K}_{EE'}(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \int e^{iE\tau - iE'\tau'} d\tau d\tau'$$
$$\times G^{(R)}(\Delta t + \tau'/2, \mathbf{r}'|\tau/2, \mathbf{r}) G^{(A)}(\Delta t - \tau'/2, \mathbf{r}'| - \tau/2, \mathbf{r}) =$$
$$= \int \exp\left\{ iE\tau - iE'\tau' - i\epsilon\left(\Delta t - \frac{\tau - \tau'}{2}\right) + i\epsilon'\left(\Delta t - \frac{\tau - \tau'}{2}\right)\right\} d\tau d\tau' \frac{d\epsilon d\epsilon'}{(2\pi)^2}$$
$$\times G^{(R)}_{\epsilon}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) G^{(A)}_{\epsilon'}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \delta(E - E') K_E(t'\mathbf{r}'|t\mathbf{r}). \qquad (7)$$

1.1 Задачи

Задача 1.

На примере квазиклассического одномерного движения в произвольном потенциале продемонстрируйте, что при $\Delta t \cdot E/\hbar \gg 1$ величина

$$K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \int e^{iE\tau} d\tau G^{(R)}(\Delta t + \tau/2, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) G^{(A)}(\Delta t - \tau/2, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) \qquad (8)$$

заметно отличается от нуля только вблизи тех точек $\mathbf{r}'$, в которых классическая частица с энергией E, стартовавшая из точки $\mathbf{r}$, может оказаться через время Δt. Докажите, что

$$K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) \sim \exp\left\{-\frac{[\Delta t - T_E(\mathbf{r}'|\mathbf{r})]^2}{t_0^2}\right\} \tag{9}$$

где $T_E(\mathbf{r}'|\mathbf{r})$ – время движения частицы с энергией E из точки $\mathbf{r}$ в точку $\mathbf{r}'$, и определите величину t_0.

Задача 2.

Докажите формулу (6). При каком условии на Δt она справедлива?

Задача 3.

Вычислите $K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})$ для свободного одномерного движения (гамильтониан $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)$). Проинтерпретируйте полученный результат в области $E > 0$ (где есть состояния) и в области $E < 0$ (где состояний нет).

Задача 4

Вычислите $K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})$ для одномерного движения в присутствии притягивающего потенциала (гамильтониан $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2) - U\delta(x)$). Убедитесь в том, что критерий локализации (убывание/неубывание $K_E(\Delta t, \mathbf{r}|\mathbf{r})$ при $\Delta t \to \infty$) действительно дает правильный результат.

2 Применение к задаче о примесях

В рассмотренных выше задачах ответ на вопрос о локализации состояний был заранее очевиден. Он, однако, совершенно не очевиден в случае потенциала, создаваемого случайно (со средней плотностью n_{imp}) расположенными в пространстве отталкивающими примесями.

Во-первых, ответ зависит от конкретного расположения примесей. Например, если примеси образуют регулярную периодическую решетку, то электронные состояния имеют зонную структуру: внутри разрешенных энергетических зон все состояния делокализованы, а внутри запрещенных зон они просто отсутствуют и поведение $K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})$ аналогично случаю свободного гамильтониана при $E < 0$. Регулярные расположения примесей, однако, слишком специальный случай; в ансамбле всех возможных конфигураций регулярные конфигурации составляют ничтожную долю (как говорят в теории вероятности – “имеют меру нуль”). Свойства типичных – нерегулярных – конфигураций, которыми мы и будем в основном интересоваться, совершенно другие.

Мы будем считать примеси одинаковыми, отталкивающими и короткодействующими (потенциал спадает достаточно быстро – на расстоянии, много меньшем, чем длина волны электрона). Места, в которых расположены примеси, будем обозначать координатами $\mathbf{R}_i$. Тогда для функции Грина можно записать

$$G_E^{(R)}(\mathbf{r}'|\mathbf{r}) = g_E^{(R)}(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) + \lambda \sum_i g_E^{(R)}(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_i) g_E^{(R)}(\mathbf{R}_i-\mathbf{r}) +$$

$$+\lambda^2 \sum_{i_1 \neq i_2} g_E^{(R)}(\mathbf{r}'-\mathbf{R}_{i_2}) g_E^{(R)}(\mathbf{R}_{i_2}-\mathbf{R}_{i_1}) g_E^{(R)}(\mathbf{R}_{i_1}-\mathbf{r}) + \ldots = \sum_\Gamma A_E(\Gamma), \quad (10)$$

$$A_E(\Gamma) = \lambda^{N_\Gamma - 2} \prod_{k=1}^{N_\Gamma - 1} g_E^{(R)}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \quad (11)$$

где $\lambda = \lambda(E)$ – комплексная амплитуда (изотропного – так как примесь короткодействующая) рассеяния электрона на уединенной примеси, $g_E^{(R)}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ – функция Грина свободного движения. Суммирование в (11) производится по всем упорядоченным (порядок существенен) последовательностям точек Γ

$$\Gamma = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_{k+1}, \ldots, \mathbf{r}_{N_\Gamma}\} \quad (12)$$

($N_\Gamma \geq 2$ – число элементов в последовательности), удовлетворяющих следующим условиям

- Первая точка – всегда $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}$
- Последняя точка – всегда $\mathbf{r}_{N_\Gamma} = \mathbf{r}'$
- Промежуточные точки ($\mathbf{r}_k$ с $2 \leq k \leq N_\Gamma - 1$) – составляют произвольную непустую последовательность примесей, в которой одна и та примесь может встречаться сколько угодно раз, но только не подряд ($i_k \neq i_{k+1}$).

В квазиклассическом случае (которым мы в основном только и будем заниматься), когда характерное расстояние между примесями много больше длины волны электрона, амплитуда $A_E(\Gamma)$ имеет простой физический смысл амплитуды перехода частицы вдоль ломаной траектории $\mathcal{T}_\Gamma$, состоящей из прямолинейных отрезков, соединяющих последовательные точки из Γ. Очевидно, что при этом

$$A_E(\Gamma) \propto \exp\{iS(\Gamma), E\}, \qquad \text{где} \quad S(\Gamma, E) \approx p(E)L(\Gamma), \quad p(E) = \sqrt{2mE}, \quad (13)$$

– соответственно, классическое действие и импульс электрона, а $L(\Gamma)$ – длина ломаной траектории $\mathcal{T}_\Gamma$.

Формулу (11) можно доказывать многими способами: с помощью частичного суммирования диаграммного ряда теории возмущений по потенциалу примесей (см. конспект моих лекций по теории перколяции), либо с помощью фейнмановского представления функции Грина в виде интеграла по траекториям.

Используя (10), мы можем записать

$$K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma\Gamma'} A_{E+\omega/2}(\Gamma) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma'). \quad (14)$$

2.1 Задачи

1. Выведите явные выражения для функции Грина свободного движения $g_E^{(R)}(\mathbf{r}'|\mathbf{r})$ в пространстве размерности $D = 1, 2, 3$
2. Выразите амплитуду рассеяния λ через потенциал примеси $V(r)$ (сферически симметричный) в Борновском приближении. Какую размерность имеет λ при различных d?
3. Определите предэкспоненциальный множитель в квазиклассической формуле (13).

3 Главное квазиклассическое приближение: диффузия

Как уже говорилось, величина K зависит от конкретной конфигурации примесей в образце. Нас интересует поведение системы в типичном случае. Можно надеяться выяснить характер такого поведения вычисляя величины, средние по всем возможным расположениям примесей (в нашем случае, $\langle K \rangle$). Вообще говоря, такая надежда оправдывается далеко не всегда и не для всех величин, и для того, чтобы это выяснить, строго говоря, необходимо оценить высшие моменты усредняемой величины (в нашем случае $\langle K^m \rangle$). Если эти моменты не демонстрируют какого-нибудь аномального роста с m, то все нормально. Мы не будем здесь заниматься этим трудным делом, скажем только, что в интересующем нас случае все оказывается более-менее спокойно и средние величины не сильно отличаются от типичных.

Итак, займемся вычислением

$$\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r}) \rangle = \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma\Gamma'} \langle A_{E+\omega/2}(\Gamma) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma') \rangle. \tag{15}$$

Усреднение в этой формуле следует понимать, как интегрирование (должным образом нормированное) по координатам примесей $\mathbf{R}_i$. Главная (экспоненциальная) зависимость величины $A_{E+\omega/2}(\Gamma) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma')$ от координат примесей содержится в множителе $\exp\{i(S(\Gamma, E+\omega/2) - S(\Gamma', E-\omega/2)\}$. В квазиклассическом пределе этот сильно осциллирующий множитель приводит к занулению соответствующих вкладов, если только по какой-то причине не оказывается, что $S(\Gamma, E+\omega/2) \approx S(\Gamma', E+\omega/2)$ при всех значениях координат примесей. Какие это могут быть причины?

1. Тривиальная причина: $\Gamma = \Gamma'$. Тогда, с учетом того, что нас интересуют очень малые $\omega \sim \Delta t^{-1} \ll E$ имеем $S(\Gamma, E+\omega/2) \approx S(\Gamma, E+\omega/2)$ для всех траекторий, кроме уж очень длинных. Глядя на формулу (13), легко сообразить, что условие “не слишком длинной траектории” имеет вид $L(\Gamma) \ll v(E)/\omega \sim v(E)\Delta t$, где $v(E)$ скорость электрона с энергией E.

2. Нетривиальная причина: $\Gamma \neq \Gamma'$ но обе эти траектории содержат замкнутые петли и отличаются друг от друга только направлением обхода этих петель. Простейший пример:

$$\Gamma = \{\mathbf{r}', \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_3, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_1, \mathbf{r}\}, \quad \Gamma' = \{\mathbf{r}', \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \mathbf{R}_1, \mathbf{r}\} \tag{16}$$

Очевидно, что длины таких двух траекторий совпадают, но сами эти траектории не тождественны друг другу и обе должны независимо учитываться в двойной сумме в (15). Ясно также, что необходимым и достаточным условием существования нетривиального партнера Γ' является наличие повторяющихся элементов в последовательности Γ. Поэтому, кроме приведенного в (16) примера тем же свойством обладают все последовательности, устроенные следующим образом: возьмем какую-нибудь произвольную последовательность Γ_0 и приделаем к ней в любом месте произвольную петлю γ. Тогда две последовательности $\Gamma \equiv \Gamma_0 \otimes \gamma$ и $\Gamma' \equiv \Gamma_0 \otimes \overline{\gamma}$ (где $\overline{\gamma}$ имеет порядок обхода, инвертированный по сравнению с γ) также, очевидно, составляют искомую пару.

Ниже мы убедимся, что траектории с петлями составляют малую долю всех траекторий, поэтому в главном квазиклассическом приближении ими просто пренебрегают, оставляя только диагональные члены в $\sum_{\Gamma\Gamma'}$:

$$\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_0 \approx \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma} \langle A_{E+\omega/2}(\Gamma) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma)\rangle =$$

$$= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma} \left\langle |\lambda|^{2(N_\Gamma - 2)} \prod_{k=1}^{N_\Gamma - 1} g^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) g^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \right\rangle, \tag{17}$$

где мы пренебрегли зависимостью λ от энергии, несущественной при малых ω.

Итак, мы предположили (это предположение еще предстоит проверить, но пока – авансом – мы его принимаем) что, в главном приближении все существенные траектории Γ не содержат повторяющихся примесей. Для таких траекторий усреднение очень легко записать в явном виде:

$$\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_0 \approx \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{N=2}^{\infty} |\lambda|^{2(N-2)}$$

$$\times \prod_{k=2}^{N-1} \int n d\mathbf{r}_k \prod_{k=1}^{N-1} g^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) g^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) =$$

$$= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{m=0}^{\infty} (n_{\mathrm{imp}}|\lambda|^2)^m K^{(m)}_E(\omega, \mathbf{r}' - \mathbf{r}), \tag{18}$$

$$K^{(m)}_E(\omega, \mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{m} \int d\mathbf{r}_k \prod_{k=0}^{m} g^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) g^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k), \tag{19}$$

где следует положить $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'$, $\mathbf{r}_{m+1} = \mathbf{r}$.

Интегрирование по координатам в (19) легче всего выполнить, если записать функции Грина в импульсном представлении:

$$g_E^{(R,A)}(\mathbf{r}) = \int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} e^{\mp i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p})} g_E^{(R,A)}(\mathbf{p}), \qquad g_E^{(R,A)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{E \pm i0 - \epsilon(\mathbf{p})} \tag{20}$$

$$\begin{aligned} K_E^{(m)}(\omega,\mathbf{r}) = \prod_{k=1}^{m} \int d\mathbf{r}_k \prod_{k=0}^{m} \int \frac{d^d\mathbf{p}_k d^d\mathbf{p}'_k}{(2\pi)^{2d}} \\ \times \frac{e^{i((\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\cdot(\mathbf{p}'_k-\mathbf{p}_k))}}{(E+\omega/2+i0-\epsilon(\mathbf{p}))(E-\omega/2-i0-\epsilon(\mathbf{p}'))} = \\ = \int \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} e^{-i(\mathbf{r}\cdot\mathbf{P})} K_E^{(m)}(\omega,\mathbf{P}) \end{aligned} \tag{21}$$

$$K_E^{(m)}(\omega,\mathbf{P}) = \left[K_E^{(1)}(\omega,\mathbf{P})\right]^{m+1} \tag{22}$$

$$K_E^{(1)}(\omega,\mathbf{P}) = \int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(E+\omega/2+i0-\epsilon(\mathbf{p}))(E-\omega/2-i0-\epsilon(\mathbf{p}+\mathbf{P}))} \tag{23}$$

Легко убедиться, однако, что интеграл (26) расходится. Значит, мы что-то не учли важное!

Действительно, мы неявно предположили, что в промежутках между рассеяниями на выделенных примесях, электрон не рассеивается ни на каких других. А этого нам на самом деле никто не гарантировал! Учет этого обстоятельства приводит к тому, что свободную функцию Грина (20) нужно заменить на функцию Грина с учетом рассеяния. Можно показать, что при условии $pl \gg 1$ многократное рассеяние на одной и той же примеси маловероятно и поэтому различные функции Грина могут усредняться независимо друг от друга. Таким образом, достаточно просто заменить во всех формулах $g_E^{(R,A)}(\mathbf{p})$ на

$$\overline{g}_E^{(R,A)}(\mathbf{p}) = \frac{1}{E \pm i/2\tau - \epsilon(\mathbf{p})} \tag{24}$$

где

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi\nu(E)|\lambda|^2 n_{\mathrm{imp}} \tag{25}$$

причем n_{imp} – концентрация примесей, а $\nu(E)$ – плотность состояний при энергии E. Величина τ имеет смысл – времени релаксации импульса. Вывод формулы (24) я прошу вас проделать в качестве задачи.

В результате интеграл сходится:

$$\overline{K}_E^{(1)}(\omega,\mathbf{P}) = \int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(E+\omega/2+i/2\tau-\epsilon(\mathbf{p}))(E-\omega/2-i/2\tau-\epsilon(\mathbf{p}+\mathbf{P}))} \tag{26}$$

Нас интересует поведение коррелятора на больших временах и расстояниях, поэтому существенны малые ω и P, по которым можно сделать разложение:

$$\begin{aligned}
&\overline{K}_E^{(1)}(\omega, \mathbf{P}) = \\
&= \int \frac{d\Omega_{\mathbf{n}}}{4\pi} \int \frac{\nu(E) d\xi}{(\omega/2 + i/2\tau - \xi))(-\omega/2 - i/2\tau - \xi - v(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}) - P^2/2m)} = \\
&= \int \frac{d\Omega_{\mathbf{n}}}{4\pi} \frac{2\pi i \nu(E)}{-\omega - i/\tau - v(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}) - P^2/2m} = \\
&= 2\pi\tau\nu(E) \int \frac{d\Omega_{\mathbf{n}}}{4\pi} (1 + i\omega\tau + iv\tau(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}) + i\tau P^2/2m - [v\tau(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P})]^2) = \\
&= 2\pi\tau\nu(E)(1 + i\omega\tau - (v\tau P)^2/2) = 2\pi\tau\nu(E)[1 + \tau(i\omega - DP^2)] \quad (27)
\end{aligned}$$

где $D = \tau v^2/2$ – коэффициент диффузии. Подставляя этот результат в формулу (18), получаем

$$\begin{aligned}
&\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_0 \approx \\
&\approx 2\pi\nu(E)\tau \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} e^{-i\omega\Delta t - i\mathbf{P}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \sum_{m=0}^{\infty} \left(n_{\mathrm{imp}}|\lambda|^2 \overline{K}_E^{(1)}(\omega, \mathbf{P})\right)^m = \\
&= 2\pi\nu(E)\tau \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} e^{-i\omega\Delta t - i\mathbf{P}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \sum_{m=0}^{\infty} \left(1 - \tau(DP^2 - i\omega)\right)^m = \\
&= 2\pi\nu(E) \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} \frac{e^{-i\omega\Delta t - i\mathbf{P}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}}{DP^2 - i\omega} = \\
&= 2\pi\nu(E)(2\pi D\Delta t)^{-d/2} \exp\left\{-\frac{(\mathbf{r}'-\mathbf{r})^2}{D\Delta t}\right\} \quad (28)
\end{aligned}$$

Итак, в главном приближении мы пришли к стандартному закону диффузионного расплывания. Таким образом, в этом приближении состояния делокализованы.

4 Локализационные поправки

Теперь обратимся к вычислению так называемой локализационной поправки, связанной с замкнутыми петлями типа (16)

$$\begin{aligned}
&\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_1 \approx \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma\Gamma'} \langle A_{E+\omega/2}(\Gamma) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma')\rangle = \\
&= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \sum_{\Gamma_0} \langle A_{E+\omega/2}(\Gamma_0) A^*_{E-\omega/2}(\Gamma_0)\rangle \sum_{k_0\in\Gamma_0} \\
&\times \sum_{\gamma} \left\langle |\lambda|^{2(N_\gamma - 2)} \int \prod_{k=2}^{m_\gamma} n_{\mathrm{imp}} d\mathbf{r}_k \prod_{k=1}^{N_\gamma - 1} \overline{g}^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1} - \mathbf{r}_k) \overline{g}^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k+1}) \right\rangle, \\
&\qquad (29)
\end{aligned}$$

где точки $\mathbf{r}_k$ лежат на замкнутом контуре γ, так что можно положить $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_{N_\gamma} = 0$. В результате получаем

$$\begin{aligned} &\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_1 = \\ &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega\Delta t} \langle K_E(\omega, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_0 \\ \times \sum_\gamma \Bigg\langle |\lambda|^{2(N_\gamma-2)} &\prod_{k=1}^{N_\gamma-1} \overline{g}^{(R)}_{E+\omega/2}(\mathbf{r}_{k+1}-\mathbf{r}_k)\overline{g}^{(A)}_{E-\omega/2}(\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_{k+1})\Bigg\rangle, \end{aligned} \tag{30}$$

Действуя аналогично тому, как это делалось в предыдущем разделе, для множителя в последней строке мы приходим к выражению

$$\int \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} \sum_{m=0}^{\infty} \Big(n_{\mathrm{imp}} |\lambda|^2 \overline{C}^{(1)}_E(\omega, \mathbf{P}) \Big)^m \tag{31}$$

где

$$\begin{aligned} \overline{C}^{(1)}_E(\omega, \mathbf{P}) = \int \frac{d^d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(E+\omega/2+i/2\tau-\epsilon(\mathbf{p}))(E-\omega/2-i/2\tau-\epsilon(-\mathbf{p}+\mathbf{P}))} = \\ = 2\pi\tau\nu(E)[1+\tau(i\omega - DP^2)] \end{aligned} \tag{32}$$

таке что

$$\begin{aligned} &\langle K_E(\Delta t, \mathbf{r}'|\mathbf{r})\rangle_1 = \\ = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d^d\mathbf{P}}{(2\pi)^d} &\frac{e^{-i\omega\Delta t - i\mathbf{P}\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}}{\tau(DP^2 - i\omega)} \left(1 + \int \frac{d^d\mathbf{P}'}{(2\pi)^d} \frac{1}{\tau(DP'^2 - i\omega)}\right) \end{aligned} \tag{33}$$

Интеграл, стоящий в скобках рядом с единицей – это и есть искомая локализационная поправка. Оценим ее.

$$\delta(\omega) \equiv \int \frac{d^d\mathbf{P}'}{(2\pi)^d} \frac{1}{DP'^2 - i\omega} \sim \frac{1}{D} \begin{cases} \dfrac{1}{l} - \dfrac{1}{L_\omega}, & d=3 \\ \ln(L_\omega/l), & d=2 \\ L_\omega - l, & d=1 \end{cases} \tag{34}$$

где $l = v\tau$ – длина свободного пробега играет роль ультрафиолетового обрезания и

$$L_\omega = \sqrt{D/\omega} \tag{35}$$

Мы видим, что в трехмерном случае главный вклад в δ дают большие импульсы (то есть маленькие петли с числом примесей порядка единицы), так что относительная поправка практически не зависит от ω

Список литературы

[1] В.Ф.Гантмахер, *Электроны в неупорядоченных средах*, М., Физматлит, 2003.

[2] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Москва,(1998).

[3] B.L.Altshuler, A.G.Aronov, *Electron-electron interactions in disordered Conductors*, in: *Electron-electron interactions in disordered systems*, eds. A.L.Efros, M.Pollak, North-Holland, Amsterdam, (1985).

[4] Л.С.Левитов и А.В.Шитов, *Функции Грина. Задачи и решения*, Москва, МЦНМО (2016)