

Фрактальные системы в природе и их необычные физические свойства.

А.С.Иоселевич

Математики придумывают регулярные фракталы - самоподобные структуры, мелкие детали которых в уменьшенном масштабе воспроизводят картину крупных. Природа создает случайные фракталы - неупорядоченные системы, для которых самоподобие выполняется только в среднем. Примеры таких систем, обладающих классическими свойствами: кластеры из слипшихся частиц, различные гели, шероховатые поверхности и пористые вещества. В квантовой физике фрактальными свойствами обладают волновые функции электрона, движущегося в неупорядоченной системе, если эта система близка к порогу локализации.

Кроме экзотических геометрических свойств, природные фракталы обладают необычными физическими характеристиками.

1 Смеси.

1. **Кластеры. Явление перколяции.** Если смешать частицы двух разных сортов – скажем, металлические (доля x) и диэлектрические (доля $1 - x$) – то некоторые частицы одного сорта будут касаться друг друга, образуя кластеры. При малом x в системе будут только малые металлические кластеры – размером порядка размера одной частицы a , и их будет мало. Наоборот, при x , близком к единице, почти все металлические частицы образуют один большой (бесконечный – в термодинамическом пределе) кластер, а маленьких кластеров опять будет мало. Бесконечный кластер имеется при $x > x_{\text{перс}}$, а при $x < x_{\text{перс}}$ его нет. При $x = x_{\text{перс}}$ происходит, как говорят, “перколяционный переход”. Вблизи этого перехода, при $x \approx x_{\text{перс}}$ как конечные кластеры (те из них, которые включают много частиц $s \gg 1$), так и бесконечный кластер, имеют фрактальные свойства в некотором большом, но конечном интервале масштабов $a < r < \xi$. На этих масштабах структура кластеров обладает свойством самоподобия

2. **Фрактальные свойства кластеров: геометрия.**

- Зависимость массы кластера M от его размера L

$$\overline{M}(L) \propto (L/a)^{d_f}, \quad \Delta M \sim \overline{M}(L), \quad (1)$$

причем величина d_f называется фрактальной размерностью. В трехмерном случае (который мы только и рассматриваем в этой лекции)

$$d_f = 2.524 \quad (2)$$

Мы видим, что $d_f < d = 3$, т.е. число узлов в кластере растет медленнее, чем его объем, так что средняя плотность на

масштабе L убывает с L как $\rho(L) \sim L^{-(d-d_f)}$. С чем связан нетривиальный степенной закон роста (1) для фрактальных объектов? Дело в том, что большой кластер размера L весь усеян дырками различных размеров r в диапазоне от $r \sim 1$ до $r \sim L$, причем распределение дырок по размерам в этом диапазоне имеет степенной вид. Геометрическая картина кластера обладает масштабной инвариантностью – родовым свойством всех фрактальных объектов. Чтобы пояснить это свойство, рассмотрим процедуру огрубления. Разобьем кластер на кубики размером L_1 , такого, что $1 \ll L_1 \ll L$ и сосчитаем число узлов M_i в каждом кубике. Те кубики, в которых оказалось $M_i < \bar{M}(L_1)$, мы сотрем и посмотрим на образовавшуюся картину из оставшихся кубиков. Она окажется подобной исходной! Разумеется, это подобие нужно понимать в статистическом смысле – в смысле эквивалентности соответствующих ансамблей: не конкретная реализация остается самоподобной при огрублении, а ансамбль огрубленных реализаций совпадает (с точностью до масштабного преобразования) с ансамблем исходных. Итак, свойство самоподобия выполняется только для средних по ансамблю величин (например, для $\bar{M}(L)$), а флуктуации от образца к образцу велики: $\Delta M \sim \bar{M}(L)$. Масса каждого “узла” в огрубленной конфигурации есть $\bar{M}(L_1)$, следовательно, для средней массы исходного кластера размером $L \gg L_1$ мы можем записать

$$\bar{M}(L) = \bar{M}(L/L_1)\bar{M}(L_1). \quad (3)$$

Этому уравнению удовлетворяют все функции $\bar{M}(L) \sim L^u$, что предопределяет степенной вид (1), однако показатель u таким образом не найдешь.

- Бесконечный кластер и его свойства на различных пространственных масштабах. Плотность бесконечного кластера:

$$P(x) \propto (x - x_{\text{perc}})^\beta \theta(x - x_{\text{perc}}), \quad \beta = 0.417. \quad (4)$$

Корреляционный радиус:

$$\xi(x) \propto |x - x_{\text{perc}}|^\nu, \quad \nu = 0.875 \quad (5)$$

На масштабах $L \gg \xi$ бесконечный кластер “самоусредняется” т.е., выглядит, как сплошная среда, характерный размер неоднородности в которой не превышает ξ . На масштабах $1 \ll L \ll \xi$ бесконечном кластере встречаются “большие” дырки и он проявляет фрактальные свойства – точно такие же, какие имеет и конечный кластер этого масштаба.

- Распределение конечных кластеров по размерам M

$$n_M(x) \approx M^{-\tau} f(M/M_c(x)), \quad M_c(x) \sim |x - x_{\text{perc}}|^{-1/\sigma}, \quad (6)$$

причем τ и σ – универсальные (зависящие только от размерности пространства) критические индексы:

$$\tau \approx 2.32, \quad \sigma_{d=3} \approx 0.453. \quad (7)$$

Явный вид функции $f(y)$ не универсален, более того, он зависит от того, с какой стороны от перехода мы находимся. Однако качественное поведение этой функции – универсально:

$$f(y) \approx \begin{cases} c_1, & \text{при } y \ll 1, \\ c_2 \exp(-y), & \text{при } y \gg 1, \end{cases} \quad (8)$$

где c_1, c_2 – некоторые константы.

- Как устроен кратчайший путь, соединяющий две точки расположенные на расстоянии R друг от друга на фрактальном кластере? Средняя длина такого пути

$$\bar{\ell}(R) \sim R^{d_{\min}}, \quad d_{\min(d=3)} \approx 1.34. \quad (9)$$

В случае бесконечного кластера формула (9) справедлива только при $R < \xi$, при $R > \xi$ восстанавливается линейный закон $\bar{\ell}(R) \sim cR$, но с большим коэффициентом c .

3. Фрактальные свойства кластеров: физика.

- Сопротивление и емкость конечного кластера проводящих частиц в диэлектрической матрице.

Средний кондактанс ($G \equiv 1/R$) фрактального кластера размером L :

$$\bar{G}(L) \approx g a^{d-2} (L/a)^{-\tilde{\zeta}}, \quad \tilde{\zeta} = 1.3. \quad (10)$$

где a – размер зерна, а g – кондактанс одного зерна.

Средняя емкость

$$\bar{C}(L) \approx L \varepsilon_0 (L/a)^{s/\nu}, \quad s \approx 0.74. \quad (11)$$

- Проводимость и диэлектрическая проницаемость бесконечного кластера проводящих частиц.

Макроскопическая (на масштабах $L \gg \xi$) проводимость системы:

$$\sigma(p) \sim g(x - x_{\text{perc}})^\mu \theta(x - x_{\text{perc}}), \quad \mu = 2.14. \quad (12)$$

Диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon_{\text{eff}}(x) \sim \varepsilon_0 (x - x_{\text{perc}})^{-s} \quad (13)$$

- Проводимость смеси сверхпроводящих (доля x) и нормальных (доля $1 - x$) металлических частиц.

В нормальной области (при $x < x_{\text{perc}}$) проводимость конечна, но расходится при приближении к порогу перколяции по сверхпроводящим гранулам:

$$\sigma = g(x_{\text{perc}} - x)^{-s} \quad (14)$$

2 Агрегаты: Diffusion-limited aggregation (DLA).

Диффундирующие (или, в другой постановке – баллистические) частицы конечного размера a , прилипают к затравке (и сами приобретают свойства затравок). Постепенно нарастает кластер из частиц, обладающий фрактальными свойствами:

$$\overline{M}(L) \propto L^{d_f}, \quad d_f < d. \quad (15)$$

Фрактальная размерность d_f зависит от деталей постановки задачи (например, от того, замирает ли частица в том положении, в каком прилипла, или ей разрешается “устроиться по-удобнее”)

3 Cluster-cluster aggregation (CCA). Gelation transition

В пространстве диффундируют частицы конечного размера a с малой концентрацией n ($na^3 \ll 1$). Как только две частицы касаются друг друга, они слипаются. Образующиеся кластеры тоже диффундируют (с коэффициентами диффузии, вообще говоря, зависящими от числа частиц в кластере M и его формы) и продолжают слипаться друг с другом. С течением времени t кластеры растут и приобретают фрактальную структуру – разбухают: $\overline{M}(t) \propto (L(t)/a)^{d_f}$. Средний размер кластеров $L(t)$ растет, концентрация кластеров $n_{cl}(t) \sim n/\overline{M}(t)$ падает, а плотность внутри кластера $n_{in}(t) \sim a^{-3}(L(t)/a)^{-(d-d_f)}$ уменьшается. В какой-то момент кластеры так разбухают, что выполняется условие $n_{cl}(t)L^3(t) \sim 1$ и конечная их доля слипается в бесконечный кластер. Образуется гель.

4 Шероховатые поверхности.

Шероховатые поверхности обычно получают методом осаждения, очень похожим на агрегацию, с той разницей, что в качестве “затравки” выступает не точка, а поверхность. Представим себе коробку с плоским квадратным дном $L \times L$ и вертикальными стенками. Сверху в нее случайным образом со скоростью ν штук в единицу времени на единицу площади падают шарики радиуса a , которые прочно прилипают к ее дну (если попадают на дно) или к ранее уже прилипшим шарикам, если попадают на них. Что за структура образуется по прошествии достаточно большого времени? Оказывается, что в нижней части коробки образуется плотное нефрактальное тело: его плотность $\rho_{dense} \sim a^{-3}$ – порядка максимальной возможной (хотя, конечно, заметно меньше него), а высота $h_{dense}(t) \sim \nu ta^3$ растет со временем по тривиальному линейному закону. Верхняя поверхность этого плотного тела представляет собой слой фрактальной “пены” со средней толщиной

$\overline{\Delta h}_{\text{fract}}(t)$, зависящей от времени. Существует некоторое характерное, зависящее от размеров коробки, время

$$t_0 \sim \frac{1}{va^2}(L/a)^\gamma, \quad \gamma > 0. \quad (16)$$

Сначала, на временах $t < t_0$, толщина поверхности $\overline{\Delta h}_{\text{fract}}$ растет со временем:

$$\overline{\Delta h}_{\text{fract}}(t) \sim a(\nu ta^2)^\beta, \quad 0 < \beta < 1, \quad (17)$$

Позднее, на временах $t > t_0$, толщина $\overline{\Delta h}_{\text{fract}}$ перестает зависеть от времени и выходит на значение

$$\overline{\Delta h}_{\text{fract}} \sim a(L/a)^\alpha, \quad \alpha = \gamma\beta < 1, \quad (18)$$

зависящее от размеров коробки. Численные значения критических индексов α, β , входящих в формулы (17,18) – неуниверсальны, они зависят от конкретного механизма прилипания частиц.

5 Пористые вещества.

Пористое вещество представляет собой частный случай смеси, в качестве одной из компонент которой выступает вещество (скажем – металл), а в качестве другой – пустота. Поэтому для описания свойств пористых тел часто используют теорию перколяции. Существует, однако, одно важное отличие: В системе не может существовать конечных металлических кластеров, так как они не могут висеть в пустоте. Следовательно, металлическая компонента всегда является связной: весь металл принадлежит одному бесконечному кластеру. В обычной двухкомпонентной смеси происходят ДВА перколяционных перехода при разных значениях x , соответствующих образованию бесконечного кластера для каждой из двух компонент. В пористой системе имеется только ОДИН переход, при котором возникает бесконечный кластер пор. Около этого перехода подсистема пор обладает фрактальными свойствами. Имеется, впрочем, и еще одна область фрактального поведения, не связанная ни с каким перколяционным переходом: это область низкой концентрации металла $x \ll 1$. Здесь практически все поры связаны в мощный (нефрактальный) бесконечный кластер, металл же образует весьма хилый бесконечный кластер с малой плотностью $P(x) = x$ и большой корреляционной длиной ξ . Последний обладает ярко выраженными фрактальными свойствами на масштабах $a < L < \xi$. Эти свойства во многом похожи на свойства гелей.

6 “Топливные элементы” – Solid Oxide Fuel Cells (SOFC)

Рассмотрим пример трехкомпонентной системы, используемой в некоторых электромобилях для преобразования энергии, выделяемой при реакции сжигания водорода $2\text{H}_2 + \text{O}_2 = 2\text{H}_2\text{O}$ непосредственно в электричество. Это смесь из металлических гранул (например, Ni) с электронным типом проводимости и гранул твердого электролита (например, $\text{ZrO}_2 + \text{Y}_2\text{O}_3$ – Yttria stabilized Zirconia), носителями тока в котором выступают ионы O^{2-} . Кроме того в системе имеются поры. Концентрации всех трех компонент этой системы выбираются таким образом, чтобы для всех них существовали бесконечные кластеры. Через систему пор подается водород H_2 , который в местах встречи всех трех бесконечных кластеров (“местах реакции”) вступает в реакцию с ионом O^{2-} , приходящим по твердому электролиту. При этом два электрона уходят через металлическую подсистему, а получающаяся молекула воды H_2O уходит через кластер пор. В результате между металлическим и твердо-электролитным бесконечными кластерами поддерживается напряжение, совершающее работу во внешней цепи. Для оптимальной работы системы желательно максимизировать количество мест реакции, не допуская при этом больших значений электрических сопротивлений обеих проводящих компонент и большого гидродинамического сопротивления системы пор. Поэтому реально работающие системы обычно проектируются так, чтобы находиться вдали от всех перколяционных переходов и их фрактальные свойства проявляются слабо.

7 Фрактальные свойства волновых функций.

7.1 Локализованные и делокализованные волновые функции: простейшие примеры и их обобщение.

В простых случаях нам интуитивно ясно, какие волновые функции $\psi(\mathbf{r})$ называть локализованными, а какие – делокализованными. Например, плоская волна $\psi(\mathbf{r}) = V^{-1/2} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$, очевидно, делокализована: плотность электрона $|\psi(\mathbf{r})|^2 = V^{-1}$ равномерно распределена по всему объему V . Если мы немного возмутим плоскую волну, (скажем – заставив ее рассеиваться на редких примесях) можно ожидать, что плотность только чуть-чуть изменится вблизи примесей, в среднем оставшись примерно постоянной. Критерием слабости возмущения является условие

$$kl \gg 1, \quad (19)$$

где k – импульс электрона, l – длина свободного пробега относительно рассеяния на примесях. Это действительно так, правда, только в системах пространственной размерности $d > 2$; в одномерных и двумерных системах

все состояния оказываются локализованными уже при сколь угодно малой концентрации примесей (т.е. при сколь угодно большой длине свободного пробега).

Наоборот, состояние электрона, связанного на уединенной примеси $\psi(\mathbf{r}) = (\pi a^3)^{-1/2} \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/a)$ – локализовано: плотность $|\psi(\mathbf{r})|^2$ экспоненциально убывает при удалении от точки \mathbf{r}_0 , где расположена примесь. Если примесей много, но их концентрация n мала ($na^3 \ll 1$), то мы ожидаем, что локализованный характер волновых функций сохранится: несмотря на наличие гибридизации благодаря туннелированию электронов между примесями, каждая волновая функция будет в основном сосредоточена около одной какой-нибудь примеси (ну, или, в крайнем случае, поделена между двумя соседними примесями), а вероятность оказаться на всех остальных будет экспоненциально мала. И это тоже верно, но только если примеси расположены случайно, а не в виде регулярной решетки: в последнем случае появятся узкие разрешенные зоны, внутри которых состояния будут делокализованы наподобие плоских волн.

7.2 Переход Андерсона и длина локализации.

Мы видим, что даже в простых предельных случаях учет беспорядка делает вопрос о локализованности волновых функций не вполне тривиальным. Тем более трудно ответить на этот вопрос в промежуточной области параметров, где делокализованные состояния превращаются в локализованные. Такое превращение происходит непрерывным образом, так что локализованные и делокализованные волновые функции вблизи локализационного перехода должны быть в каком-то смысле очень похожи друг на друга. Как это возможно?

Для начала отметим, что достичь локализационного перехода можно по-разному:

- Можно, не изменяя степени беспорядка W и других параметров системы, изменять энергию электрона E . Тогда переход произойдет при $E = E_m(W)$, где величина $E_m(W)$ называется краем подвижности (mobility edge).
- Можно, наоборот, изменять параметры, не меняя E . Тогда переход произойдет при $W = W_c(E)$.

Оказывается, что вблизи перехода в системе возникает новый большой пространственный масштаб – длина локализации ξ , которая расходится при приближении к переходу:

$$\xi(E, W) \propto \left| 1 - \frac{E}{E_m(W)} \right|^{-\nu} \sim \left| 1 - \frac{W}{W_c(E)} \right|^{-\nu}, \quad \nu_{d=3} \approx 1.58 \quad (20)$$

с универсальным критическим индексом ν . Зависимость (20) и численное значение ν были определены в многочисленных численных экспериментах.

Например:

$$\nu_{d=3} \approx 1.58 \quad (21)$$

Длина ξ играет роль, похожую на роль корреляционной длины в теории перколяции: на масштабах $r \ll \xi$ волновые функции обладают фрактальными свойствами, на этих масштабах отличить локализованное состояние от локализованного просто невозможно: в обоих случаях волновая функция состоит из нерегулярно чередующихся провалов и пиков разной величины, характеристики которых случайны и описываются универсальными степенными функциями распределения. Только на масштабах $r \gg \xi$ волновая функция, наконец, “делает свой выбор” по отношению к локализации. Если она делокализована, то флуктуации на таких больших масштабах самоусредняются и огрубленная (т.е., усредненная на масштабах $r \lesssim \xi$) плотность электрона $\langle |\psi(r)|^2 \rangle_\xi \approx \text{const}$ оказывается равномерно распределенной по всему пространству. Наоборот, если волновая функция локализованная, то на расстояниях $r \gg \xi$ мы замечаем, что огрубленная плотность электрона $\langle |\psi(r)|^2 \rangle_\xi \propto e^{-r/\xi}$ экспоненциально спадает.

Отметим здесь некоторую аналогию с теорией перколяции: локализованные функции аналогичны конечным кластерам, делокализованные – бесконечному.

7.3 Как отличить локализованную функцию от делокализованной в общем случае?

Попробуем придумать явный математический объект (это должен быть какой-то функционал от волновой функции $\psi(\mathbf{r})$), вычисляя который, мы будем, после усреднения по беспорядку, автоматически получать ответ на вопрос, локализовано ли типичное состояние при заданных значениях параметров. Конечно, хотелось бы, чтобы объект был по-проще. Самое простое – это какая-нибудь билинейная комбинация из $\psi(\mathbf{r})$. Однако все такие билинейные комбинации выражаются через одночастичную функцию Грина системы $G_E^{R,A}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Известно, что усредненная по беспорядку одночастичная функция Грина совершенно не чувствует локализационного перехода: например, в некоторых моделях удается точно найти усредненную плотность состояний

$$\nu(E) \equiv \mp \frac{1}{\pi V} \int d\mathbf{r} \text{Im} \left\{ \langle G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \rangle \right\}, \quad (22)$$

$$G_E^{(R,A)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_\alpha \frac{\psi_\alpha(\mathbf{r}) \psi_\alpha^*(\mathbf{r}')}{E - E_\alpha \pm i0} \quad (23)$$

при произвольном уровне беспорядка, причем $\nu(E)$ оказывается абсолютно гладкой функцией как энергии E , так и величины беспорядка W во всем интервале их изменения. С другой стороны, как хорошо известно

из качественных соображений и численных расчетов, для трехмерной системы на плоскости параметров E, W существует некоторая линия, разделяющая локализованные и делокализованные состояния. Значит, $\nu(E)$ не испытывает никаких особенностей при переходе через эту линию и не может служить индикатором локализации.

Таким индикатором может служить какая-нибудь биквадратная комбинация, например, остаточная (т.е., при $T = 0$) статическая проводимость системы σ . Действительно, σ обращается в нуль, если уровень Ферми лежит в области локализованных состояний. Однако простейшим объектом, чувствующим локализацию, по-видимому, является так называемый ‘Inverse participation ratio’

$$P_2 = \int |\psi_E(\mathbf{r})|^4 d^d \mathbf{r} \quad (24)$$

Рассмотрим его среднее значение для большой, но конечной системы размером L . Глубоко в локализованной области, когда волновая функция сосредоточена в компактной области размером $a \ll L$, очевидно $\langle P_2(E, L) \rangle \sim a^{-d}$ и не зависит от L . Глубоко в металлической области, когда волновая функция мало отличается от плоской волны, $\langle P_2(E, L) \rangle \sim L^{-d}$ и обращается в нуль при $L \rightarrow \infty$. Таким образом, кажется разумным положить обращение в нуль величины $\lim_{L \rightarrow \infty} \langle P_2(E, L) \rangle$ в качестве критерия делокации. Интересно проследить за поведением $\langle P_2(E, L) \rangle$ вблизи порога локализации, где ξ велико:

$$\langle P_2(E, L) \rangle \sim \frac{1}{a_0^d} \begin{cases} (\xi/a_0)^{d-D_2} (L/a_0)^{-d}, & L \gg \xi, \quad \text{metal} \\ (L/a_0)^{-D_2}, & L \ll \xi, \quad \text{critical} \\ (\xi/a_0)^{-D_2}, & L \gg \xi, \quad \text{insulator} \end{cases} \quad (25)$$

где a_0 – ‘ультрафиолетовый’ (минимальный) пространственный масштаб. Например, если мы рассматриваем систему на решетке, то a_0 – постоянная решетки. Наиболее нетривиальной частью формулы (25) представляется необычная степенная зависимость в критической области: величина фрактальной размерности $D_2 < d$. Например,

$$D_2 \approx \begin{cases} 1.3 < 3, & d = 3, \\ 0.9 < 4, & d = 4. \end{cases} \quad (26)$$

Этот факт подтверждает наличие рыхлой фрактальной структуры волновых функций на малых масштабах, уже упоминавшейся нами выше, причем ‘степень фрактальности’ (характеризующаяся отличием D_2 от d) возрастает с ростом размерности пространства.

Кроме величины P_2 представляют интерес и другие корреляторы:

например, двухточечный коррелятор

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle |\psi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}')|^2 \rangle - L^{-2d} \sim \quad (27)$$

$$\sim \begin{cases} L^{-2d}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi)^{-(d-D_2)}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll \xi \ll L, \text{ metal} \\ L^{-2d}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/L)^{-(d-D_2)}, & |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll L \ll \xi, \text{ critical} \\ (\xi/L)^{-(d-D_2)} \exp\{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/\xi\}, & \xi \ll |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \ll L, \text{ insulator} \end{cases} \quad (28)$$

Можно найти и двухточечный коррелятор для двух разных волновых функций: $K_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', E_i - E_j) = \langle |\psi_i(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r}')|^2 \rangle - L^{-2d}$, а также и многоточечные корреляторы, но мы не будем здесь углубляться в эти вопросы.

7.4 Модель Андерсона: простейший пример квантовой неупорядоченной системы без взаимодействия.

Для иллюстрации мы кратко рассмотрим здесь модель Андерсона на регулярной решетке с диагональным беспорядком, описываемую гамильтонианом

$$\hat{H} = t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + a_i a_j^+) + \sum_i \epsilon_i a_i^+ a_i, \quad (29)$$

где $\langle ij \rangle$ обозначает пару ближайших соседей, t – матричный элемент перескока электрона между ближайшими соседями, а решетка предполагается идеальной. Спиновые индексы, по которым гамильтониан диагонален, для краткости опущены.

Гамильтониан (29) характеризуется набором N (N – число узлов в решетке) одноузельных энергий ϵ_i – *независимых* случайных параметров, каждый из которых описывается функцией распределения $P(\epsilon)$ (одинаковой для всех узлов). В исходной работе Андерсона функция $P(\epsilon)$ была выбрана в виде

$$P_A(\epsilon) = \frac{1}{W} \theta(W/2 - \epsilon), \quad (30)$$

но рассматриваются также и вариант с гауссовым распределением

$$P_G = \frac{1}{\sqrt{2\pi}W} \exp\{-\epsilon^2/2W^2\}, \quad (31)$$

и вариант с лоренцевым распределением

$$P_L = W/\pi(\epsilon^2 + W^2), \quad (32)$$

7.4.1 Сильный беспорядок

В случае сильного беспорядка $W \gg t$ подавляющее большинство электронных состояний является одноузельными: каждое из них сосредоточено на одном каком-нибудь узле i_0 :

$$\psi_{i_0}(i) \approx \delta_{ii_0}, \quad E_{i_0} \approx \epsilon_{i_0}. \quad (33)$$

Амплитуды типичных волновых функций экспоненциально спадают при удалении от центрального узла: $\psi_{i_0}(i) \propto (t/W)^{|i-i_0|}$. В низшем порядке по t/W

$$\psi_{i_0}(i) \approx \delta_{i i_0} + \sum_{j:\langle i_0 j \rangle} [t/(\epsilon_{i_0} - \epsilon_j)] \delta_{ij}, \quad E_{i_0} \approx \epsilon_{i_0} + \sum_{j:\langle i_0 j \rangle} [t^2/(\epsilon_{i_0} - \epsilon_j)]. \quad (34)$$

Формулы (33) справедливы, если энергии всех ближайших соседних узлов не слишком близки к энергии центрального: $|\epsilon_{i_0} - \epsilon_j| \gg t$. Ясно, что это условие выполняется почти для всех i_0 . Имеется, однако малая доля ($\sim t/W$) резонансных пар $\langle ij \rangle$, для которых $|\epsilon_i - \epsilon_j| \lesssim t$, для таких пар волновая функция примерно поровну распределена между ее компонентами. Резонансных троек еще меньше.

7.4.2 Слабый беспорядок

В случае слабого беспорядка, наоборот, в главном приближении можно пренебречь величинами ϵ_i и характеризовать состояния волновым вектором \mathbf{k} и номером зоны μ :

$$\psi_{\mu, \mathbf{k}}(i) \approx \exp\{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i\} u_{\mu}(\mathbf{k}, \mathbf{w}_i), \quad E_{\mathbf{k}} \approx \varepsilon_{\mu}(\mathbf{k}). \quad (35)$$

Где \mathbf{R}_i обозначает положение центра той элементарной ячейки, в которой находится i -й атом, а $\mathbf{w}_i \equiv \mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i$ – расстояние от атома до этого центра. Волновой вектор \mathbf{k} пробегает значения в зоне Бриллюэна (BZ). Поправки к волновым функциям и энергиям (35) можно найти, учитывая ϵ_i по теории возмущений.

7.4.3 Фазовая диаграмма

Ансамбль гамильтонианов (29) характеризуется тремя величинами размерности энергии: E, t, W и, соответственно, двумя глобальными безразмерными параметрами: W/t и E/T . Важно понимать, что при любых значениях параметра W/t в ансамбле гамильтонианов найдутся как такие, при которых состояние с данной энергией E будет локализовано, так и такие, при которых оно будет делокализовано. В термодинамическом пределе (когда число узлов решетки N стремится к бесконечности) в подавляющем большинстве случаев будет осуществляться только одна из этих двух возможностей, так что можно говорить либо о локализации, либо о делокации с вероятностью единица. При этом необходимый размер системы оказывается тем больше, чем ближе к порогу локализации находятся глобальные параметры.

На рисунке 1 показана линия, разделяющая области локализованных и делокализованных состояний для модели Андерсона на d -мерной гиперкубической решетке с распределением (30). Кроме того, выделены области, где состояний вообще нет (объясните сами, в качестве задачи).

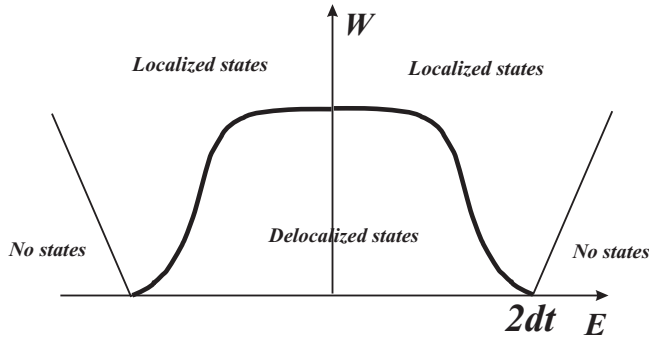


Рис. 1: Области локализованных и делокализованных состояний на плоскости $E - W$

7.4.4 Качественное описание перехода Андерсона.

Мы приведем здесь оценку критического беспорядка W_c , такого, что при $W > W_c$ все состояния в системе локализованы. Эта оценка основана на идеях и результатах теории перколяции.

Ясно, что при увеличении W последним локализуется состояние с $E = 0$, в центре зоны. Поэтому W_c отвечает как раз локализации состояния с $E = 0$.

Возьмем какие-нибудь два соседних узла в решетке i и j с энергиями E_i и E_j . Понятно, что, если $|E_i - E_j| \ll t$, волновые функции будут сильно обобществлены между этими двумя узлами: $\psi_{1,2} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_i \pm \psi_j)$. Наоборот, при $|E_i - E_j| \gg t$ узлы практически не гибридизуются: $\psi_{1,2} \approx \psi_{i,j}$.

Рассмотрим теперь волновую функцию с энергией $E = 0$. Наше приближение будет состоять в том, что мы полностью пренебрежем вкладом в эту функцию "нерезонансных" узлов с $|E_i| > \Delta/2$ (где Δct , конкретный выбор величины c – наиболее скользкое место, см. ниже). Наоборот, гибридизацию "резонансных" узлов с $|E_i| > \Delta/2$ будем считать очень сильной. Все множество резонансных узлов при этом разобьется на кластеры ближайших соседей, в точности так же, как в задаче о перколяции. Очевидно, конечные кластеры могут нести на себе только локализованные волновые функции, причем соответствующие собственные энергии будут дискретны и, вообще говоря, не равны нулю. Делокализованное состояние с $E = 0$ может жить только на бесконечном кластере, поэтому в качестве грубой оценки момента локализации можно рассмотреть тот момент, когда в системе возникает бесконечный кластер, т.е., когда $\Delta/W = x_{\text{perc}}$ – порогу перколяции в задаче узлов для данной решетки.

Для выбора численного коэффициента c пользуются следующими сомнительными рассуждениями: вблизи порога перколяции локальная структура бесконечного кластера интуитивно представляется состоящей из довольно длинных одномерных нитей (на самом деле это не совсем верно).

Пространственная размерность	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$
$4/x_{\text{perc}}$ (sites)	6.8	12.9	20	28.6
W_c/t	6.1	14.4	25	36

Ширина зоны в такой гипотетической одномерной структуре $\Delta_{\text{band}} = 4t$. Отождествляя (почему?) величину Δ с величиной Δ_{band} , мы приходим к условию

$$W_c/t = 4/x_{\text{perc}} \quad (36)$$

Несмотря на очевидную паткусть приведенных выше количественных оценок, формула (36) дает недурное согласие с численным экспериментом для гиперкубических решеток:

7.5 Мультифрактальность волновых функций вблизи критической точки (локализационного перехода).

Наряду с $\langle P_2 \rangle$ – вторым моментом плотности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ интересно рассмотреть и более высокие моменты:

$$P_q = \int |\psi_E(\mathbf{r})|^{2q} d^d \mathbf{r} \quad (37)$$

Для этих моментов можно получить формулы, аналогичные (25)

$$\langle P_q(E, L) \rangle \sim \frac{1}{a_0^{d(q-1)}} \begin{cases} (\xi/a_0)^{[d(q-1)-\tau_q]} (L/a_0)^{-d(q-1)}, & L \gg \xi, \text{ metal} \\ (L/a_0)^{-\tau_q}, & L \ll \xi, \text{ critical} \\ (\xi/a_0)^{-\tau_q}, & L \gg \xi, \text{ insulator} \end{cases} \quad (38)$$

где

$$\tau_q = D_q(q-1) \quad (39)$$

Набор величин D_q называется спектром фрактальных размерностей. Наличие множества различных фрактальных размерностей называется мультифрактальностью. Ниже мы увидим, что мультифрактальность связана с существованием длинных хвостов у функции распределения для E . Если бы мы наивно решили, что размер R локализованного состояния (т.е., длину локализации) можно определить из P_q просто “по размерности”, то мы пришли бы к парадоксальному результату

$$R_q \sim \langle P_q(E,) \rangle^{-\frac{1}{d(q-1)}} \sim a_0 (\xi/a_0)^{D_q/d}, \quad (40)$$

зависящему от q , т.е., от того, какой конкретный момент плотности $|\psi(\mathbf{r})|^2$ выбран для усреднения. Причина этого парадокса в следующем: волновая функция занимает область локализации не плотно, а выборочно: места,

где плотность велика, хаотически чередуются с местами, где она мала. При этом конкретный смысл, вкладываемый в слова “мала” и “велика” зависит от величины q : при увеличении q главную роль начинают играть все более малые аномальные области со все большими значениями плотности. Поэтому величина R_q уменьшается с ростом q .

Легко убедиться в том, что знание функции D_q позволяет восстановить всю функцию распределения плотности $\mathcal{P}(|\psi|^2)$. В критической области ее можно представить в виде

$$\mathcal{P}(|\psi|^2) \sim \frac{1}{|\psi|^2 L^d} \exp \left\{ \ln L f \left(-\frac{\ln |\psi|^2}{\ln L} \right) \right\} \quad (41)$$

где вид функции $f(\alpha)$ определяется уравнениями

$$q = \frac{df(\alpha)}{d\alpha}, \quad (42)$$

$$\tau_q = q\alpha - f(\alpha). \quad (43)$$

Действительно, вычисляя

$$\langle P_q(E, L) \rangle \equiv L^d \int d|\psi|^2 \mathcal{P}(|\psi|^2) |\psi|^{2q} \quad (44)$$

по методу перевала (что оправдано большой величиной $\ln L$, получим Действительно, вычисляя

$$\langle P_q(E, L) \rangle = -\ln L \int d\alpha \exp \{ \ln L (f(\alpha) - q\alpha) \} \propto L^{-q\alpha(q) - f(\alpha(q))} \quad (45)$$

где $\alpha(q)$ нужно находить из уравнения (42). Отождествляя результат (45) с нижней строкой формулы (38), мы приходим к условию (43). Отметим еще, что должны быть выполнены очевидные требования

$$\tau_0 = -L \quad \tau_1 = 0 \quad (46)$$

(второе из них следует из нормированности волновых функций).

Найти точное аналитическое выражение для функции $f(\alpha)$ не удастся, однако численные результаты показывают, что в трехмерном случае с очень хорошей точностью $f(\alpha)$ аппроксимируется в виде полинома второй степени. После удовлетворения требований (46) в этом полиноме остается всего один свободный параметр α_0 :

$$f(\alpha) = d - \frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{4(\alpha_0 - d)}, \quad D_q = d - (\alpha_0 - d)q \quad (47)$$

Наилучшему совпадению с численными данными соответствуют

$$\alpha_0 \approx \begin{cases} 4.03, & d = 3, \\ 6.5, & d = 4 \end{cases} \quad (48)$$

Итак, мы получили так называемое “лог-нормальное распределение” для волновой функции

$$\mathcal{P}(|\psi|^2) \sim \frac{1}{|\psi|^2} \exp \left\{ -\frac{[\ln^2(|\psi/\psi_0|^2)]}{4(\alpha_0 - d) \ln L} \right\} \quad (49)$$

где $\psi_0 \sim L^{-\alpha_0/2}$ имеет смысл типичного значения ψ :

$$|\psi_{\text{тип}}|^2 \equiv \exp\{\langle \ln |\psi|^2 \rangle\} = |\psi_0|^2. \quad (50)$$

Величина $\alpha_0 - d$ характеризует степень мультифрактальности системы:

$$\frac{dD_q}{dq} = \alpha_0 - d, \quad \langle \ln |\psi/\psi_0|^2 \rangle = 2(\alpha_0 - d). \quad (51)$$

Таким образом, мультифрактальность (как и вообще фрактальность) растет с ростом d .