

# Граничные условия, распределение фаз и скрытая симметрия в одномерной локализации

И.М.Суслов

Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН,

119334, Москва, Россия

E-mail: suslov@kapitza.ras.ru

Рассматриваются одномерные неупорядоченные системы со случайным потенциалом малой амплитуды и короткодействующими корреляциями для энергий вблизи края зоны идеального кристалла. Получено уравнение эволюции для совместной функции распределения  $P(\rho, \psi)$  ландауэровского сопротивления  $\rho$  и фазовой переменной  $\psi = \theta - \varphi$  ( $\theta$  и  $\varphi$  — фазы, входящие в трансфер-матрицу) при изменении длины системы  $L$ . В пределе больших  $L$  уравнение допускает разделение переменных, что обеспечивает существование стационарного распределения  $P(\psi)$ , определяющего коэффициенты в уравнении эволюции для  $P(\rho)$ . Предельное распределение  $P(\rho)$  при  $L \rightarrow \infty$  является логнормальным и не зависит от граничных условий. Оно определяется "внутренним" распределением фазы  $\psi$ , форма которого изучена во всей области энергий, включая запрещенную зону. Приближение случайных фаз справедливо в глубине разрешенной зоны, но сильно нарушается при других энергиях. Фаза  $\psi$  оказывается "плохой" переменной, а "правильной" переменной является  $\omega = -\text{ctg } \psi/2$ . Форма стационарного распределения  $P(\omega)$  определяется внутренними свойствами системы и не зависит от граничных условий. Изменение граничных условий приводит к масштабному преобразованию  $\omega \rightarrow s\omega$  и трансляциям  $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$  и  $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$ , что определяет "внешнее" распределение фаз, входящее в уравнения эволюции. Независимость предельного распределения  $P(\rho)$  от внешнего распределения  $P(\psi)$  позволяет говорить о скрытой симметрии, характер которой выявляется ниже.

## 1. Введение

При исследовании одномерных неупорядоченных систем удобно использование трансфер-матрицы  $T$ , которая связывает амплитуды волн слева ( $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ) и справа ( $Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ ) от рассеивателя,

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad (1)$$

и при наличии инвариантности относительно обращения времени допускает параметризацию [1]:

$$T = \begin{pmatrix} 1/t & -r/t \\ -r^*/t^* & 1/t^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\rho+1} e^{i\varphi} & \sqrt{\rho} e^{i\theta} \\ \sqrt{\rho} e^{-i\theta} & \sqrt{\rho+1} e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где  $t$  и  $r$  — амплитуды прохождения и отражения и  $\rho = |r/t|^2$  — безразмерное сопротивление по Ландауэру [2]. При последовательном расположении рассеивателей их трансфер-матрицы перемножаются. Для слабого рассеивателя матрица  $T$  близка к единичной, что позволяет выводить дифференциальные уравнения эволюции для ее параметров и в частности — для ландауэровского сопротивления  $\rho$ .

В приближении случайных фаз (когда распределения  $\varphi$  и  $\theta$  считаются однородными)

такое уравнение для распределения  $P(\rho)$  имеет вид (параметр  $D$  — порядка обратной длины пробега) [3]–[8]

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ \rho(1+\rho) \frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right] \quad (3)$$

и описывает эволюцию начального распределения  $P_0(\rho) = \delta(\rho)$  на нулевой длине  $L$  к логнормальному распределению при больших  $L$ .

Согласно [9], распределение фаз  $\varphi$  и  $\theta$  перестает быть однородным при введении полунепроницаемых границ, отделяющих систему от присоединенных к ней идеальных контактов, даже если оно было однородным в исходной системе; в последнем случае возникает более общее уравнение

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ -\gamma(1+2\rho)P(\rho) + \rho(1+\rho) \frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right], \quad (4)$$

которое в приближении случайных фаз сводится к (3). Последнее приближение хорошо работает в глубине разрешенной зоны для "естественных" идеальных контактов (изготовленных из того же материала, что изучаемая система, но без примесей), что обычно и предполагается в теоретических работах (см. ссылки в [10, 11, 12]); ситуация внутри запрещенной зоны рассматривается сравнительно

редко [13, 14, 15] и лишь на уровне волновых функций. Для исследования эволюции  $P(\rho)$  при произвольном положении уровня Ферми (включая запрещенную зону) требуется введение "чужеродных" контактов из хорошего металла<sup>1</sup>, что автоматически усложняет граничные условия. Это приводит к еще более общему уравнению [16]

$$\frac{\partial P(\rho)}{\partial L} = D \frac{\partial}{\partial \rho} \left[ -\gamma_1(1+2\rho)P(\rho) - 2\gamma_2\sqrt{\rho(1+\rho)}P(\rho) + \rho(1+\rho)\frac{\partial P(\rho)}{\partial \rho} \right], \quad (5)$$

коэффициенты которого в пределе больших  $L$  определяются стационарным распределением фаз (см. ниже (34)). Для больших  $L$  типичные значения  $\rho$  велики и уравнение (5) сводится к (4) с  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ . На Рис.1 показана зависимость параметра  $\gamma$  от  $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$ , где  $\mathcal{E}$  — энергия Ферми, отсчитанная от нижнего края зоны, и  $W$  — амплитуда случайного потенциала (все энергии измеряются в единицах интеграла перекрытия для одномерной модели Андерсона, см. ниже (13)). Параметр  $\gamma$  близок к нулю в глубине разрешенной зоны в соответствии с приближением случайных фаз, но нарушение последнего во всем энергетическом интервале представляет собой совсем не малый эффект. Такое нарушение происходит по внутренним причинам и введение полупрозрачных границ не является для этого необходимым. Более того, предельное (логнормальное) распределение  $P(\rho)$  в области больших  $L$

$$P(\rho) = \frac{1}{\rho\sqrt{4\pi DL}} \exp\left\{-\frac{[\ln \rho - vL]^2}{4DL}\right\}, \quad (6)$$

где  $v = (2\gamma + 1)D$ , определяется внутренними свойствами изучаемой системы (Рис.2) и не зависит от граничных условий.

Зависимость  $\gamma$  от  $\tilde{\mathcal{E}}$  (Рис.1) однозначно свидетельствует о нарушении приближения случайных фаз, но получена в [16] на основе анализа моментов распределения (см. ниже), при котором вопрос о распределении фаз полностью обходится. Прояснение вопроса о распределении фаз необходимо для логической завершенности теории одномерной локализации и является целью настоящей работы. Это неразрывно связано с исследованием роли граничных условий и требует разрешения кажущихся противоречий.

<sup>1</sup> Нетрудно понять, что для энергий внутри запрещенной зоны идеального кристалла "естественные" идеальные контакты оказываются непроводящими, тогда как в изучаемой неупорядоченной системе имеются флуктуационные состояния.

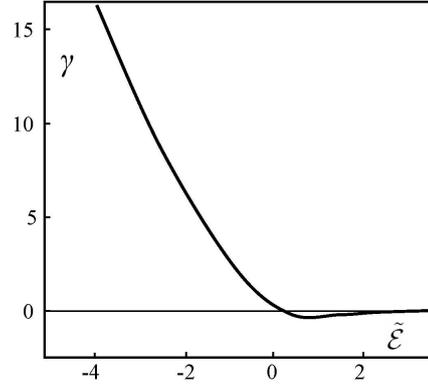


Рис. 1: Зависимость параметра  $\gamma$  в уравнении (4) от приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$ . Параметр  $\gamma$  мал в глубине разрешенной зоны в соответствии с приближением случайных фаз.

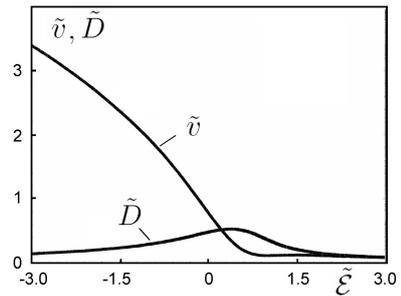


Рис. 2: Зависимость параметров  $\tilde{v} = v/W^{2/3}$  и  $\tilde{D} = D/W^{2/3}$  от приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/W^{4/3}$ . Равенство  $v = D$ , справедливое в приближении случайных фаз, реализуется лишь в глубине разрешенной зоны.

Действительно, в работах [9, 16] высказаны два утверждения, которые выглядят трудно совместимыми. С одной стороны, изменение граничных условий существенно влияет на распределение фаз, которое в общем случае меняет параметры уравнений эволюции (3–5) и даже их структуру. С другой стороны, эти изменения не влияют на форму предельного распределения (6) в области больших  $L$ . Справедливость этих утверждений означает, что в системе имеется скрытая симметрия, т.е. инвариантность физических параметров относительно некоторого класса преобразований. С теоретической точки зрения, выявление скрытой симметрии представляет безусловный интерес, указывая на возможность существенных упрощений. Практически же, без выяснения характера указанной инвариантности невозможно отделить реальные физические эффекты от фиктивных. Выявление этой инвариантности оказывается очень нетривиальным и требует вывода уравнений эволюции в наиболее общем виде.

Поясним происхождение двух упомянутых утверждений. При изменении граничных условий трансфер-матрица  $T$  преобразуется в  $\tilde{T} = T_l T T_r$ , где  $T_l$  и  $T_r$  — краевые матрицы, связывающие амплитуды волн слева и справа от границы раздела. Таким образом, изменение граничных условий приводит к линейному преобразованию элементов трансфер-матрицы. Линейное преобразование не меняет показателей экспоненциального роста для вторых и четвертых моментов, которые находятся по известной матрице  $T$  и определяются внутренними свойствами системы. Знание этих двух показателей позволяет установить "коэффициент диффузии"  $D$  и "скорость дрейфа"  $v$  в предельном распределении (6) (Рис.2), которые таким образом не зависят от граничных условий [16]; после этого нетрудно получить поведение параметра  $\gamma$  (Рис.1).

Влияние граничных условий на распределение фаз легко продемонстрировать путем введения точечных рассеивателей на границах системы, когда

$$\tilde{T} = T_l T T_r, \quad T_l = T_r = \begin{pmatrix} 1 - i\chi & -i\chi \\ i\chi & 1 + i\chi \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Принимая для  $\tilde{T}$  параметризацию (2), получим в главном приближении при больших  $\chi$

$$\begin{aligned} \sqrt{1+\rho} e^{i\varphi} &= -\chi^2 T', & \sqrt{\rho} e^{i\theta} &= -\chi^2 T', \\ \sqrt{\rho} e^{-i\theta} &= \chi^2 T', & \sqrt{1+\rho} e^{-i\varphi} &= \chi^2 T', \end{aligned} \quad (8)$$

где  $T' = T_{11} - T_{12} + T_{21} - T_{22}$  и  $T_{ij}$  — элементы матрицы  $T$ . При больших  $\chi$  имеем  $\rho \sim \chi^4$ , так что  $1+\rho \approx \rho$  и

$$\varphi = \pm\pi/2, \quad \theta = \pm\pi/2 \quad \text{при} \quad \chi \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Таким образом, при больших  $\chi$  фазы  $\varphi$  и  $\theta$  локализируются вблизи значений  $\pm\pi/2$ , независимо от их распределения в исходной системе.

С физической точки зрения ситуация выглядит следующим образом (Рис.3). В глубине достаточно длинной неупорядоченной системы реализуется некоторое "внутреннее" распределение фаз, не зависящее от граничных условий. При рассмотрении системы со стороны идеальных контактов наблюдается "внешнее" распределение фаз, определяемое граничными условиями; именно такие фазы входят в трансфер-матрицу. Влияние границ раздела существенно на масштабе порядка длины локализации  $\xi$ , что определяет переходную область, в которой внутреннее распределение фаз постепенно трансформируется к внешнему. В пределе больших  $L$  распределение  $P(\rho)$  определяется внутренним распределением фаз, что обеспечивает его независимость от граничных условий. Однако, в уравнения эволюции входит именно внешнее распределение фаз<sup>2</sup>, и нужно понять, почему это не влияет на предельное распределение  $P(\rho)$ . Второй вопрос, связанный с первым, состоит в следующем: каким образом можно найти внутреннее распределение фаз, если оно не входит в уравнения?

Обсудим характер упомянутой инвариантности. Изменение матрицы  $T$  с длиной системы  $L$  определяется соотношением

$$T_{L+\Delta L} = T_L T_{\Delta L}, \quad (10)$$

где матрица  $T_{\Delta L}$  близка к единичной, что позволяет выводить дифференциальные уравнения эволюции. Для перехода к другим граничным условиям умножим (10) слева и справа на краевые матрицы  $T_l$  и  $T_r$ , вводя произведение  $T_r T_r^{-1} = 1$  между двумя сомножителями:

$$T_l T_{L+\Delta L} T_r = T_l T_L T_r \cdot T_r^{-1} T_{\Delta L} T_r. \quad (11)$$

Тогда для матрицы  $\tilde{T}_L = T_l T_L T_r$  справедливо соотношение, аналогичное (10),

$$\tilde{T}_{L+\Delta L} = \tilde{T}_L T'_{\Delta L}, \quad (12)$$

где матрица  $T'_{\Delta L} = T_r^{-1} T_{\Delta L} T_r$  по-прежнему близка к единичной. Переход от  $T_{\Delta L}$  к

<sup>2</sup> Это вполне естественно, так как при малых  $L$  внутреннее распределение фаз вообще не проявляется, и граничные условия существенно влияют на распределение  $P(\rho)$ , как это подробно обсуждалось в [16].

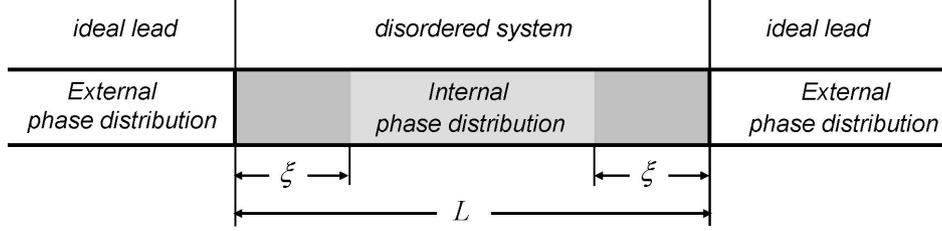


Рис. 3: Внешнее и внутренне распределение фаз.

$T'_{\Delta L}$  изменяет форму уравнений эволюции, определяемую параметрами  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\Delta$ ,  $\epsilon^2$  (см. разд. 2, 3), а переход от  $T_L$  к  $\tilde{T}_L$  меняет стационарное распределение фаз, определяющее коэффициенты в уравнении (5) для  $P(\rho)$ . Эти два фактора должны компенсировать друг друга, чтобы предельное распределение  $P(\rho)$  оставалось инвариантным. Однако, уравнения эволюции не обладают никакой очевидной инвариантностью, и ее выявление требует серьезных усилий. Разрешение этих трудностей непосредственно связано с решением вопроса о внутреннем распределении фаз.

## 2. Последовательность точечных рассеивателей

Как ясно из опыта работы [16], анализ удобно проводить для энергий внутри запрещенной зоны идеального кристалла, а описание разрешенной зоны получать как аналитическое продолжение. Для определенности рассматриваем одномерную модель модель Андерсона

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + V_n \Psi_n = E \Psi_n \quad (13)$$

вблизи края зоны, где она соответствует дискретизации обычного уравнения Шредингера ( $E$  — энергия, отсчитанная от центра зоны).

Описание рассеивателя внутри запрещенной зоны осуществляется с помощью псевдо-трансфер-матрицы  $t$ , связывающей решения слева ( $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ ) и справа ( $Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$ ) от рассеивателя. Матрица  $t^{(n)}$  для последовательности рассеивателей с амплитудами  $V_0, V_1, V_2, \dots, V_n$ , находящихся в точках  $0, L_1, L_1 + L_2, \dots, L_1 + L_2 + \dots + L_n$ , имеет вид

$$t^{(n)} = t_{\epsilon_0} t_{\delta_1} t_{\epsilon_1} t_{\delta_2} t_{\epsilon_2} \dots t_{\delta_n} t_{\epsilon_n}, \quad (14)$$

где

$$t_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 + \bar{\epsilon}_n & \bar{\epsilon}_n \\ -\bar{\epsilon}_n & 1 - \bar{\epsilon}_n \end{pmatrix}, \quad \bar{\epsilon}_n = \frac{V_n}{2\kappa a_0}, \quad (15)$$

$$t_{\delta_n} = \begin{pmatrix} e^{-\delta_n} & 0 \\ 0 & e^{\delta_n} \end{pmatrix}, \quad \delta_n = \kappa L_n$$

и  $a_0$  — межатомное расстояние. Переход к истинной трансфер-матрице  $T^{(n)} = T_l t^{(n)} T_r$  осуществляется с помощью краевых матриц, описывающих присоединение к системе идеальных контактов. Вводя произведение  $T_r T_l = 1$  между каждыми двумя множителями в

(14), имеем<sup>3</sup>

$$T^{(n)} = T_{\epsilon_0} T_{\delta_1} T_{\epsilon_1} T_{\delta_2} T_{\epsilon_2} \dots T_{\delta_n} T_{\epsilon_n}, \quad (16)$$

где

$$T_{\epsilon_n} = T_l t_{\epsilon_n} T_r, \quad T_{\delta_n} = T_l t_{\delta_n} T_r. \quad (17)$$

В модели Андерсона рассеиватели находятся на каждом узле решетки, поэтому все  $\delta_n$  одинаковы,  $\delta_n = \kappa a_0$ . Примеры краевых матриц даны ниже, и в наиболее общем случае приводят к следующей структуре матриц  $T_{\epsilon_n}$  и  $T_{\delta}$

$$T_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 - i\epsilon_n & \epsilon_n e^{i\gamma} \\ \epsilon_n e^{-i\gamma} & 1 + i\epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \epsilon_n = K \bar{\epsilon}_n, \quad (18)$$

$$T_{\delta} = \begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^* & \mathcal{A}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \Delta^2} e^{i\alpha} & \Delta e^{i\beta} \\ \Delta e^{-i\beta} & \sqrt{1 + \Delta^2} e^{-i\alpha} \end{pmatrix}.$$

Матрица  $T_{\delta}$  является трансфер-матрицей общего вида, тогда как для  $T_{\epsilon_n}$  достаточно указанной формы. В дальнейшем считаем, как обычно, что все  $V_n$  статистически независимы,  $\langle V_n \rangle = 0$ ,  $\langle V_n^2 \rangle = W^2$ . Тогда уравнения эволюции будут определяться параметрами  $\alpha, \beta, \gamma, \Delta$  и величиной

$$\epsilon^2 = \langle \epsilon_n^2 \rangle = \text{const } W^2. \quad (19)$$

Внутри разрешенной зоны для "естественных" идеальных контактов последовательность точечных рассеивателей описывается не произведением (14), а произведением (16), где

$$T_{\epsilon_n} = \begin{pmatrix} 1 - i\epsilon_n & -i\epsilon_n \\ i\epsilon_n & 1 + i\epsilon_n \end{pmatrix}, \quad \epsilon_n = \frac{V_n}{2\bar{k}a_0},$$

$$T_{\delta_n} = \begin{pmatrix} e^{-i\delta_n} & 0 \\ 0 & e^{i\delta_n} \end{pmatrix}, \quad \delta_n = \bar{k}L_n, \quad (20)$$

и  $\bar{k}$  — фермиевский импульс в изучаемой системе, что соответствует замене  $\kappa \rightarrow i\bar{k}$  в предыдущих соотношениях. Такая замена соответствует гладкому переходу от энергии  $\mathcal{E} = -\kappa^2$  в запрещенной зоне к  $\mathcal{E} = \bar{k}^2$  в разрешенной. При изменении граничных условий возникают матрицы  $\tilde{T}_{\epsilon_n} = T_l T_{\epsilon_n} T_r$  и  $\tilde{T}_{\delta_n} = T_l T_{\delta_n} T_r$ , имеющие структуру (18).

### 3. Уравнения эволюции

<sup>3</sup> Условие  $T_r T_l = 1$  может быть принято без ограничения общности. Если это не так, то полагаем  $T_l = T_l' T_l''$ , где  $T_r T_l'' = 1$ , и используем матрицу  $T_l''$  в качестве  $T_l$ . При этом роль матрицы  $T_l'$  сводится к изменению начальных условий в уравнениях эволюции, тогда как их структура не меняется.

Воспользуемся рекуррентным соотношением

$$T^{(n+1)} = T^{(n)} T_{\delta} T_{\epsilon}, \quad (21)$$

где матрицы  $T^{(n)}$  и  $T_{\epsilon}$  статистически независимы, а  $T_{\delta}$  постоянна. Принимая для  $T^{(n)}$  параметризацию (2) и обозначая параметры матрицы  $T^{(n+1)}$  как  $\tilde{\rho}, \tilde{\varphi}, \tilde{\theta}$ , имеем

$$\sqrt{1 + \tilde{\rho}} e^{i\tilde{\varphi}} = \sqrt{1 + \rho} e^{i\varphi} (\mathcal{A} + \epsilon \mathcal{C}) + \sqrt{\rho} e^{i\theta} (\mathcal{B}^* + \epsilon \mathcal{D}^*),$$

$$\sqrt{\tilde{\rho}} e^{i\tilde{\theta}} = \sqrt{1 + \rho} e^{i\varphi} (\mathcal{B} + \epsilon \mathcal{D}) + \sqrt{\rho} e^{i\theta} (\mathcal{A}^* + \epsilon \mathcal{C}^*), \quad (22)$$

где мы положили

$$\mathcal{C} = \mathcal{B} e^{-i\gamma} - i\mathcal{A} \quad \mathcal{D} = \mathcal{A} e^{i\gamma} + i\mathcal{B}. \quad (23)$$

В дальнейшем рассматриваем предел

$$\delta \rightarrow 0, \quad \epsilon \rightarrow 0, \quad \delta/\epsilon^2 = \text{const} \quad (24)$$

и сохраняем члены первого порядка по  $\delta$  и второго по  $\epsilon$ . Возводя по модулю в квадрат одно из уравнений (22), получим

$$\tilde{\rho} = \rho + \mathcal{K} \sqrt{\rho(1 + \rho)} + \epsilon^2 (1 + 2\rho), \quad (25)$$

где

$$\mathcal{K} = 2\Delta \cos(\psi - \beta) + 2\epsilon \cos(\psi - \gamma) - 2\epsilon^2 \sin(\psi - \gamma) \quad (26)$$

и введена комбинированная фаза

$$\psi = \theta - \varphi. \quad (27)$$

Теперь возьмем произведение второго уравнения (22) с комплексно сопряженным первым

$$\sqrt{\tilde{\rho}(1 + \tilde{\rho})} e^{i\tilde{\psi}} = (1 + 2\rho) [\Delta e^{i\beta} + \epsilon e^{i\gamma} + i\epsilon^2 e^{i\gamma}] +$$

$$+ \sqrt{\rho(1 + \rho)} [(e^{-2i\alpha} + 2i\epsilon - \epsilon^2) e^{i\psi} + \epsilon^2 e^{2i\gamma - i\psi}]. \quad (28)$$

Исключая  $\tilde{\rho}$  с помощью уравнения (25), получим связь  $\tilde{\psi}$  и  $\psi$

$$\tilde{\psi} = \psi + 2(\epsilon - \alpha) + (R^2/2 - 1)\epsilon^2 \sin 2(\psi - \gamma) -$$

$$- R [\Delta \sin(\psi - \beta) + \epsilon \sin(\psi - \gamma) + \epsilon^2 \cos(\psi - \gamma)], \quad (29)$$

где

$$R = \frac{1 + 2\rho}{\sqrt{\rho(1 + \rho)}}. \quad (30)$$

Используя (22), (26) и следуя схеме работ [9, 16, 17], получим уравнение эволюции для  $P(\rho, \psi)$

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \epsilon^2 [1 - 2 \cos^2(\psi - \gamma)] (1 + 2\rho) P - \right.$$

$$\begin{aligned}
& -2 [\Delta \cos(\psi - \beta) + \epsilon^2 \sin(\psi - \gamma)] \sqrt{\rho(1 + \rho)} P + \\
& + 2\epsilon^2 \cos^2(\psi - \gamma) \rho(1 + \rho) P'_\rho + \\
& + 2\epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) [2 - R \sin(\psi - \gamma)] \sqrt{\rho(1 + \rho)} P'_\psi \Big\}'_\rho + \\
& + \left\{ \epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) [2 \sin(\psi - \gamma) - R] P + \right. \\
& + [2\alpha + R\Delta \sin(\psi - \beta)] P + \\
& \left. + \frac{1}{2} \epsilon^2 [2 - R \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_\psi \right\}'_\psi. \quad (31)
\end{aligned}$$

Правая часть является суммой полных производных, что обеспечивает сохранение вероятности. Связь распределений  $\rho$  и  $\psi$  определяется величиной  $R$ , которая стремится к 2 в пределе больших  $L$ , когда типичные значения  $\rho$  велики. Тогда решение уравнения (31) факторизуется,  $P(\rho, \psi) = P(\rho)P(\psi)$ , хотя ситуация несколько необычна для разделения переменных (см. Приложение 1); уравнение эволюции для  $P(\psi)$  отщепляется

$$\begin{aligned}
\frac{\partial P(\psi)}{\partial L} = & \left\{ [2\alpha + 2\Delta \sin(\psi - \beta) - 2\epsilon^2 \cos(\psi - \gamma) + \right. \\
& + \epsilon^2 \sin 2(\psi - \gamma)] P(\psi) + \\
& \left. + 2\epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_\psi(\psi) \right\}'_\psi \quad (32)
\end{aligned}$$

и дает условие для стационарного распределения фазы  $\psi$

$$\begin{aligned}
& \epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)]^2 P'_\psi - \\
& - \epsilon^2 [1 - \sin(\psi - \gamma)] \cos(\psi - \gamma) P + \\
& + [\alpha + \Delta \sin(\psi - \beta)] P = C_0, \quad (33)
\end{aligned}$$

где константа  $C_0$  определяется из нормировки.<sup>4</sup>

Усреднение по  $\psi$  приводит к уравнению (5) с параметрами

$$\begin{aligned}
D & = 2\epsilon^2 \langle \cos^2(\psi - \gamma) \rangle, \\
\gamma_1 D & = \epsilon^2 \langle 1 - 2\cos^2(\psi - \gamma) \rangle, \quad (34) \\
\gamma_2 D & = \Delta \langle \cos(\psi - \beta) \rangle - \epsilon^2 \langle \sin(\psi - \gamma) \rangle,
\end{aligned}$$

откуда для "скорости дрейфа" в (6) получим

$$\begin{aligned}
v & = 2\Delta \langle \cos(\psi - \beta) \rangle + \\
& + 2\epsilon^2 \langle \sin^2(\psi - \gamma) - \sin(\psi - \gamma) \rangle. \quad (35)
\end{aligned}$$

Входящие в (34, 35) средние определяются стационарным распределением  $P(\psi)$ .

<sup>4</sup> Уравнения (31, 32) аналогичны уравнениям (10.27), (10.28) в книге [10], выведенным в рамках другого формализма, так что связь входящих в них величин с параметрами трансфер-матрицы не очевидна. То же относится к уравнениям (39, 40) в работе [18].

#### 4. Зависимость от свойств идеальных контактов

Пусть фермиевский импульс  $k$  в идеальных контактах отличен от фермиевского импульса  $\bar{k}$  в изучаемой системе, а граница раздела является резкой. Тогда краевые матрицы в запрещенной зоне могут быть выбраны в виде

$$T_l = \begin{pmatrix} l & l^* \\ l^* & l \end{pmatrix}, \quad T_r = \begin{pmatrix} r & r^* \\ r^* & r \end{pmatrix}, \quad (36)$$

$$l = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\kappa}{ik} \right), \quad r = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{ik}{\kappa} \right),$$

приводя к результатам (18) для матриц  $T_{\epsilon_n}$  и  $T_\delta$  с параметрами

$$\begin{aligned}
\alpha & = -\frac{1}{2} \left( \frac{k}{\kappa} - \frac{\kappa}{k} \right) \delta = \frac{\kappa^2 - k^2}{2k} a_0, \\
\beta & = \frac{\pi}{2}, \quad \gamma = -\frac{\pi}{2}, \quad \epsilon^2 = \bar{\epsilon}^2 \left( \frac{\kappa}{k} \right)^2 = \frac{W^2}{4k^2 a_0^2}, \quad (37)
\end{aligned}$$

$$\Delta = \frac{1}{2} \left( \frac{k}{\kappa} + \frac{\kappa}{k} \right) \delta = \frac{\kappa^2 + k^2}{2k} a_0,$$

которые являются регулярными функциями энергии  $\mathcal{E} = -\kappa^2$  и аналитически продолжаютя в разрешенную зону. Тогда для параметров  $D$  и  $v$  имеем

$$D = 2\epsilon^2 \langle \sin^2 \psi \rangle, \quad (38)$$

$$v = 2\Delta \langle \sin \psi \rangle + 2\epsilon^2 \langle 1 - \cos \psi \rangle - 2\epsilon^2 \langle \sin^2 \psi \rangle,$$

а уравнение для стационарного распределения  $P(\psi)$  принимает вид

$$\begin{aligned}
& \epsilon^2 (1 - \cos \psi)^2 P'_\psi + \epsilon^2 \sin \psi (1 - \cos \psi) P + \\
& + (\alpha - \Delta \cos \psi) P = C_0. \quad (39)
\end{aligned}$$

Замена переменных в уравнении (39)

$$\omega = -\text{ctg} \psi / 2 \quad (40)$$

с учетом перенормировки вероятности  $P \rightarrow P(1 + \omega^2)/2$ , следующей из  $P(\psi)d\psi = P(\omega)d\omega$ , приводит его к простой форме

$$P'_\omega + P(b + a\omega^2) = C_0, \quad (41)$$

где

$$a = \frac{\alpha - \Delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\alpha + \Delta}{2\epsilon^2} \quad (42)$$

или

$$\alpha = \epsilon^2(b + a), \quad \Delta = \epsilon^2(b - a). \quad (43)$$

Уравнение (41) интегрируется в квадратурах, но эта квадратура практически бесполезна. Более эффективным оказывается исследование

трансформационных свойств. Если  $P_{a,b}(\omega)$  — решение уравнения (41), то справедливо соотношение

$$P_{a,b}(\omega) = s^{-1} P_{as^3, bs}(\omega/s). \quad (44)$$

Оно устанавливается с помощью замены  $\omega = s\tilde{\omega}$  и приведения уравнения к прежнему виду путем переопределения параметров  $\tilde{a} = as^3$ ,  $\tilde{b} = bs$ , так что  $P_{a,b}(\omega)$  совпадает с  $P_{\tilde{a},\tilde{b}}(\tilde{\omega})$  с точностью до коэффициента, который устанавливается из нормировки. Заметим, что

$$ab = \frac{\alpha^2 - \Delta^2}{4\epsilon^4} = -\frac{\delta^2}{4\epsilon^4}, \quad (45)$$

и масштабное преобразование  $a \rightarrow as^3$ ,  $b \rightarrow bs$  приводит к перенормировке  $\epsilon \rightarrow \tilde{\epsilon}$ , где

$$\tilde{\epsilon} = \epsilon s^{-1} = \tilde{\epsilon} \frac{\kappa}{k} s^{-1}. \quad (46)$$

Подставляя (37) в (43), получим исходные значения параметров  $a$  и  $b$

$$a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\kappa}{k} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad (47)$$

после чего соотношения (33) позволяют установить перенормировку  $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$ ,  $\Delta \rightarrow \tilde{\Delta}$  в результате масштабного преобразования

$$\tilde{\alpha} = \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa}{k} s^{-1} - \frac{k}{\kappa} s \right) \delta, \quad \tilde{\Delta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\kappa}{k} s^{-1} + \frac{k}{\kappa} s \right) \delta. \quad (48)$$

Соотношения (46) и (48) показывают, что преобразование всех параметров  $\alpha$ ,  $\Delta$ ,  $\epsilon^2$ , входящих в уравнения эволюции, сводится к замене

$$\frac{k}{\kappa} \rightarrow \frac{k}{\kappa} s, \quad (49)$$

эквивалентной изменению фермиевского импульса в идеальных контактах. И наоборот, изменение свойств идеальных контактов приводит к масштабному преобразованию распределения  $P(\omega)$ .

### 5. Влияние $\delta$ -образного потенциала на границе

Если на границе раздела между изучаемой системой и идеальными проводниками имеется  $\delta$ -образный потенциал, то краевые матрицы (36) преобразуются к виду

$$T_l = \begin{pmatrix} l & l_1^* \\ l^* & l_1 \end{pmatrix}, \quad l = \frac{ik + \kappa - \kappa_1}{2ik}, \quad l_1 = \frac{ik + \kappa + \kappa_1}{2ik}, \quad (50)$$

$$T_r = \begin{pmatrix} r & r^* \\ r_1^* & r_1 \end{pmatrix}, \quad r = \frac{ik + \kappa - \kappa_2}{2\kappa}, \quad r_1 = \frac{ik + \kappa + \kappa_2}{2\kappa},$$

где  $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  определяют скачки логарифмической производной волновой функции на левой и правой границах раздела. Условие  $T_r T_l = 1$  справедливо при  $\kappa_2 = -\kappa_1$ , что можно принять без ограничения общности (см. примечание 3). Тогда матрица  $T_{\epsilon_n}$  остается неизменной, а матрица  $T_\delta$  принимает вид (18) с параметрами

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{k^2 - \kappa^2 + \kappa_1^2}{2\kappa k} \delta, \\ \Delta \cos \beta &= -\frac{\kappa_1}{\kappa} \delta, \\ \Delta \sin \beta &= \frac{k^2 + \kappa^2 - \kappa_1^2}{2\kappa k} \delta, \end{aligned} \quad (51)$$

которые, как и раньше (ввиду  $\delta = \kappa a_0$ ), регулярны по энергии  $\mathcal{E} = -\kappa^2$ . Таким образом, по-прежнему имеем  $\gamma = -\pi/2$ , тогда как параметр  $\beta$  становится отличным от  $\pi/2$ . Замена (40) приводит уравнение (33) к виду

$$P'_\omega + P(b + c\omega + a\omega^2) = C_0, \quad (52)$$

с параметрами

$$a = \frac{\alpha - \Delta \sin \beta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\alpha + \Delta \sin \beta}{2\epsilon^2}, \quad c = -\frac{\Delta \cos \beta}{\epsilon^2}, \quad (53)$$

что после подстановки физических значений (51) дает

$$a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad b = \frac{\kappa^2 - \kappa_1^2}{\kappa k} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad c = \frac{\kappa_1}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}. \quad (54)$$

Решение уравнения (52) удовлетворяет соотношению

$$P_{a,b,c}(\omega) = s^{-1} P_{as^3, bs, cs^2}(\omega/s). \quad (55)$$

и, как нетрудно проверить, масштабное преобразование  $P(\omega)$  по-прежнему соответствует изменению фермиевского импульса  $k$  в идеальных контактах.

Нетрудно видеть, что сдвиг  $\omega \rightarrow \omega - \omega_0$  переменной  $\omega$  позволяет привести уравнение (52) к виду (41), что дает соотношение

$$P_{a,b,c}(\omega) = P_{\tilde{a},\tilde{b},0}(\omega + \omega_0), \quad (56)$$

$$\omega_0 = -\frac{\kappa_1}{k}, \quad \tilde{a} = a = -\frac{k}{\kappa} \frac{\delta}{2\epsilon^2}, \quad \tilde{b} = \frac{\kappa}{k} \frac{\delta}{2\epsilon^2},$$

где значения параметров  $\tilde{a}$  и  $\tilde{b}$  соответствуют ситуации  $\kappa_1 = 0$ . Таким образом, появление  $\delta$ -образного потенциала на границе приводит к трансляции распределения  $P(\omega)$  на величину  $\omega_0$ , пропорциональную амплитуде  $\delta$ -образного потенциала.

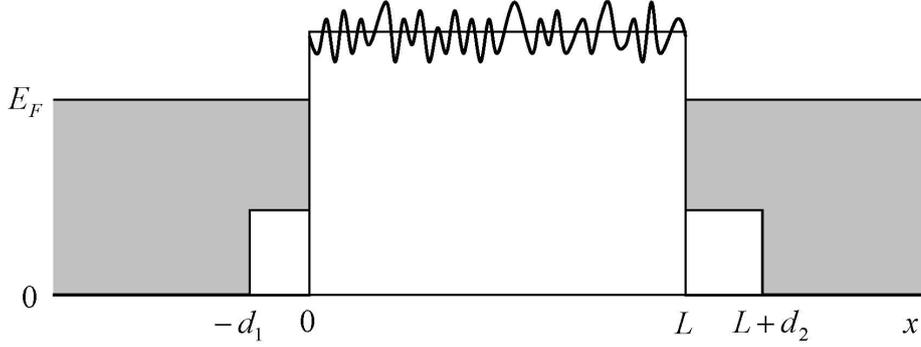


Рис. 4: Модель для учета размытия границ раздела.

## 6. Размытие границы раздела

Если рассматриваются энергии внутри запрещенной зоны, то изучаемая система при отсутствии примесей сводится к потенциальному барьеру. Размытие границ раздела можно моделировать, вводя прослойки металла с фермиевским импульсом  $k_1$  и толщинами  $d_1$  и  $d_2$  на границах системы (Рис.4). Краевые матрицы  $T_l$  и  $T_r$  для такой модели приведены в Приложении 2. Условие  $T_r T_l = 1$  выполняется, если  $d_1$  и  $d_2$  подчинить ограничениям

$$k_1(d_1+d_2) = 2\pi m, \quad k(d_1+d_2) = 2\pi n, \quad (57)$$

где  $m$  и  $n$  — целые числа. Матрица  $T_\delta$  является трансфер-матрицей общего вида, и ее вычисление не представляет интереса. Для матрицы  $T_{\epsilon_n}$  получается выражение (18) с параметрами

$$K = \frac{\kappa \mathcal{R}}{k_1}, \quad \gamma = \arcsin\left(\frac{\sin \alpha}{\mathcal{R}}\right) - \alpha - \frac{\pi}{2}, \quad (58)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{R} &= \mathcal{P} + \mathcal{Q} \cos \alpha, \quad \alpha = k_1(d_2 - d_1), \\ \mathcal{P} &= \frac{k_1^2 + k^2}{2kk_1}, \quad \mathcal{Q} = \frac{k_1^2 - k^2}{2kk_1}. \end{aligned} \quad (59)$$

Значение  $\gamma$ , отличное от  $-\pi/2$ , получается при  $d_1 \neq d_2$ . Поскольку параметр  $\gamma$  входит как в выражения (34,35) для  $D$  и  $v$ , так и в уравнение (33) для стационарного распределения  $P(\psi)$ , то сдвигом  $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$  его можно привести к значению  $-\pi/2$ , что приводит лишь к переопределению параметра  $\beta$ . После этого замена переменных (40) приводит к уравнению (52) предыдущего раздела.

Если фермиевский импульс  $k_1$  выбран пропорциональным  $k$ , то параметры  $\mathcal{P}$  и  $\mathcal{Q}$  являются постоянными, и масштабное преобразование  $P(\omega)$  по-прежнему приводит к перенормировке (49) фермиевского импульса  $k$ . В общем случае пропорциональность  $k_1 \propto k$  не имеет места, но изменение свойств идеальных контактов по-прежнему приводит к масштабному преобразованию  $P(\omega)$ , однако с более сложной связью импульса  $k$  и масштабного фактора  $s$ .

## 7. Общий подход к краевым матрицам

Обсудим общий подход к исследованию роли граничных условий, не связанный с модельными предположениями. Для этого нужно выяснить степень произвола, допустимого в краевых матрицах

Как указывалось в разд.2, условие  $T_r T_l = 1$  может быть принято без ограничения общности. Согласно (16,17), для нас актуальны выражения, содержащие одинаковое число матриц  $T_r$  и  $T_l$ , а следовательно общие множители можно свободно извлекать из одной матрицы и переносить в другую. Поэтому без ограничения общности матрицы  $T_r$  и  $T_l$  можно выбрать в виде

$$T_l = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad T_r = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}, \quad ad - bc = 1, \quad (60)$$

принимая единичное значение для детерминантов. Роль краевых матриц наиболее существенна в запрещенной зоне — с их помощью псевдо-трансфер-матрица  $t$  превращается в истинную трансфер-матрицу  $T = T_l t T_r$ . Условие того, что матрица  $T$  является истинной трансфер-матрицей, выражается соотношениями для матричных элементов  $T_{ij}$  [19]<sup>5</sup>

$$\begin{aligned} T_{11}T_{11}^+ - T_{12}T_{12}^+ &= 1, \\ T_{22}T_{22}^+ - T_{21}T_{21}^+ &= 1, \\ T_{11}T_{21}^+ - T_{12}T_{22}^+ &= 0, \end{aligned} \quad (61)$$

которые следуют из условия сохранения потока.

Потребуем, чтобы матрицы  $T_\delta$  и  $T_\epsilon$ , входящие в (16,17) были истинными трансфер-матрицами. Тогда (см. Приложение 3) допустимые краевые матрицы образуют трехпараметрическое семейство

$$T_l = \begin{pmatrix} |r_1|e^{i\alpha_1} & |r_2|e^{i\alpha_2} \\ \pm i|r_1|e^{-i\alpha_1} & \pm i|r_2|e^{-i\alpha_2} \end{pmatrix}, \quad 1 = 2|r_1 r_2| \sin(\alpha_2 - \alpha_1), \quad (62)$$

где верхний знак выбирается при  $\sin(\alpha_2 - \alpha_1) > 0$ , а нижний — в противоположном случае. Тогда для матриц  $T_\delta$  и  $T_\epsilon$  получим выражения (18) с параметрами

$$\begin{aligned} \alpha &= -2\delta|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1), \\ \beta &= \alpha_1 + \alpha_2, \\ \gamma &= 2\alpha_1 - 2 \arcsin \frac{|r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1)}{r}, \\ \Delta &= 2\delta|r_1||r_2|, \end{aligned} \quad (63)$$

$$K = r^2 = |r_1|^2 + |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1).$$

Аналогичный анализ в разрешенной зоне приводит к физически очевидному результату —

<sup>5</sup> Мы приводим эти соотношения в виде, пригодном для описания квазиодномерных систем, когда элементы  $T_{ij}$  являются матрицами.

краевые матрицы являются истинными трансфер-матрицами общего вида

$$T_l = \begin{pmatrix} |r_1|e^{i\alpha_1} & |r_2|e^{i\alpha_2} \\ |r_2|e^{-i\alpha_2} & |r_1|e^{-i\alpha_1} \end{pmatrix}, \quad |r_1|^2 - |r_2|^2 = 1. \quad (64)$$

Для матриц  $T_\delta$  и  $T_\epsilon$  получаются выражения (18) с параметрами

$$\begin{aligned} \alpha &= -\delta(|r_1|^2 + |r_2|^2), \\ \beta &= \pi/2 + \alpha_1 + \alpha_2, \\ \gamma &= -\frac{\pi}{2} + 2\alpha_1 - 2 \arcsin \frac{|r_2| \cos(\alpha_1 - \alpha_2)}{r}, \\ \Delta &= 2\delta|r_1||r_2|, \end{aligned} \quad (65)$$

$$K = r^2 = |r_1|^2 + |r_2|^2 - 2|r_1||r_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1).$$

Как ясно из предыдущих разделов, весь трехпараметрический произвол краевых матриц может быть реализован физически, а уравнения эволюции, приведенные в разд.3, являются наиболее общими.

## 8. Распределение $P(\omega)$

Как ясно из предыдущего, наиболее общие результаты для параметров уравнения эволюции (5) и предельного распределения (6) даются соотношениями (34, 35), где усреднение по  $\psi$  производится по стационарному распределению  $P(\psi)$ , определяемому уравнением (33). Сдвиг  $\psi \rightarrow \psi + \psi_0$  позволяет привести параметр  $\gamma$  к значению  $-\pi/2$ , после чего замена переменных  $\omega = -\text{ctg}\psi/2$  приводит к уравнению (52). Далее трансляция  $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$  переводит (52) в уравнение (41), которое масштабным преобразованием  $\omega \rightarrow s\omega$  может быть приведено к одной из канонических форм — либо с  $|a| = |b|$ , либо с  $a = -1$ , зависящих от одного параметра; этот однопараметрический произвол ассоциируется с зависимостью от приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}}$ . Таким образом, форма распределения  $P(\omega)$  с  $\omega = -\text{ctg}\psi/2$  определяется внутренними свойствами системы, тогда как изменение граничных условий переводит его в распределение  $P(\tilde{\omega})$ , где переменная

$$\tilde{\omega} = \omega_0 - s \text{ctg} \frac{\psi + \psi_0}{2} \quad (66)$$

связана с  $\omega$  дробно-линейным преобразованием

$$\tilde{\omega} = \frac{A\omega + B}{C\omega + D}. \quad (67)$$

Согласно [16], ситуация  $|a| = |b|$  является выделенной тем, что в глубине разрешенной

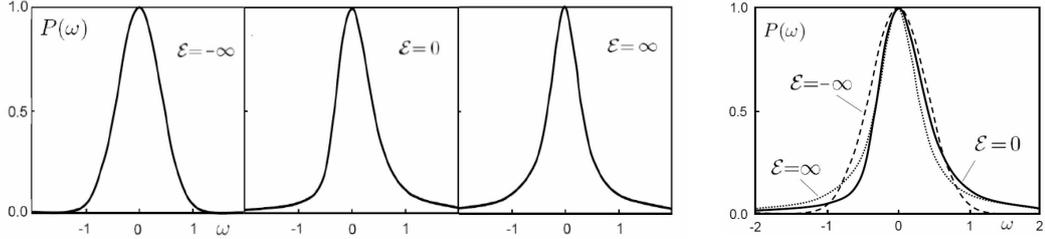


Рис. 5: Распределения  $P(\omega)$  для разных энергий мало отличаются друг от друга.

и запрещенной зон параметры уравнения (5) остаются постоянными до очень малых масштабов<sup>6</sup> длины  $L$ . Случай  $a=b$ , реализуемый в разрешенной зоне соответствует "естественным" идеальным контактам (разд.1). При  $-a=-b \gg 1$  (в глубине разрешенной зоны) в уравнении (41) можно опустить член  $P'_\omega$  и получить

$$P(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1+\omega^2}, \quad (68)$$

что соответствует  $P(\psi) = \text{const}$ , т.е. приближению случайных фаз. При  $-a = b \gg 1$  (в глубине запрещенной зоны) константой  $C_0$  в (41) можно пренебречь вблизи максимума распределения, и полагая  $\omega = -1 + \tilde{\omega}$ , получим  $P'_\omega \approx -2|a|\tilde{\omega}P$ , что дает гауссовское распределение

$$P(\omega) = \sqrt{\frac{|a|}{\pi}} \exp\{-|a|\tilde{\omega}^2\}, \quad (69)$$

локализованное вблизи  $\omega = -1$ ; оно соответствует гауссовскому распределению  $P(\psi)$ , локализованному вблизи  $\pi/2$  [16]. При нарушении условия  $|a| = |b|$  в разрешенной зоне возникают

<sup>6</sup> Для достаточно больших  $L$  они всегда постоянны, так как определяются стационарным распределением  $P(\psi)$ .

осцилляции распределения  $P(\rho, \psi)$ , связанные с тем, что матрица  $T$  при отсутствии примесей является матрицей потенциального барьера, который становится прозрачным, если на его ширине укладывается полуцелое число волн де Бройля (аналогично просветлению в оптике) [16]. При нарушении условия  $|a| = |b|$  в запрещенной зоне распределение  $P(\rho, \psi)$  локализуется вблизи значения  $\psi$ , отличного от  $\pi/2$ , что приводит к его медленной релаксации к последнему значению.

Вблизи края исходной зоны уравнение (41) удобно приводить к канонической форме с  $a = -1$ . Его решение при  $b = 0$  соответствует "критической" области для размытого перехода Андерсона [16] и может быть представлено в виде (см. Приложение 4)

$$P(\omega) = A_0 \int_0^\infty dt e^{-t} t^{-1/3} \frac{\omega}{\omega^3 + 3t}, \quad (70)$$

где  $A_0$  определяется из нормировки. При больших  $\omega$  имеем  $P(\omega) \sim \omega^{-2}$ , что является общим свойством (см. Приложение 4) и соответствует конечным значениям  $P(\psi)$  на границах интервала  $(0, 2\pi)$ .

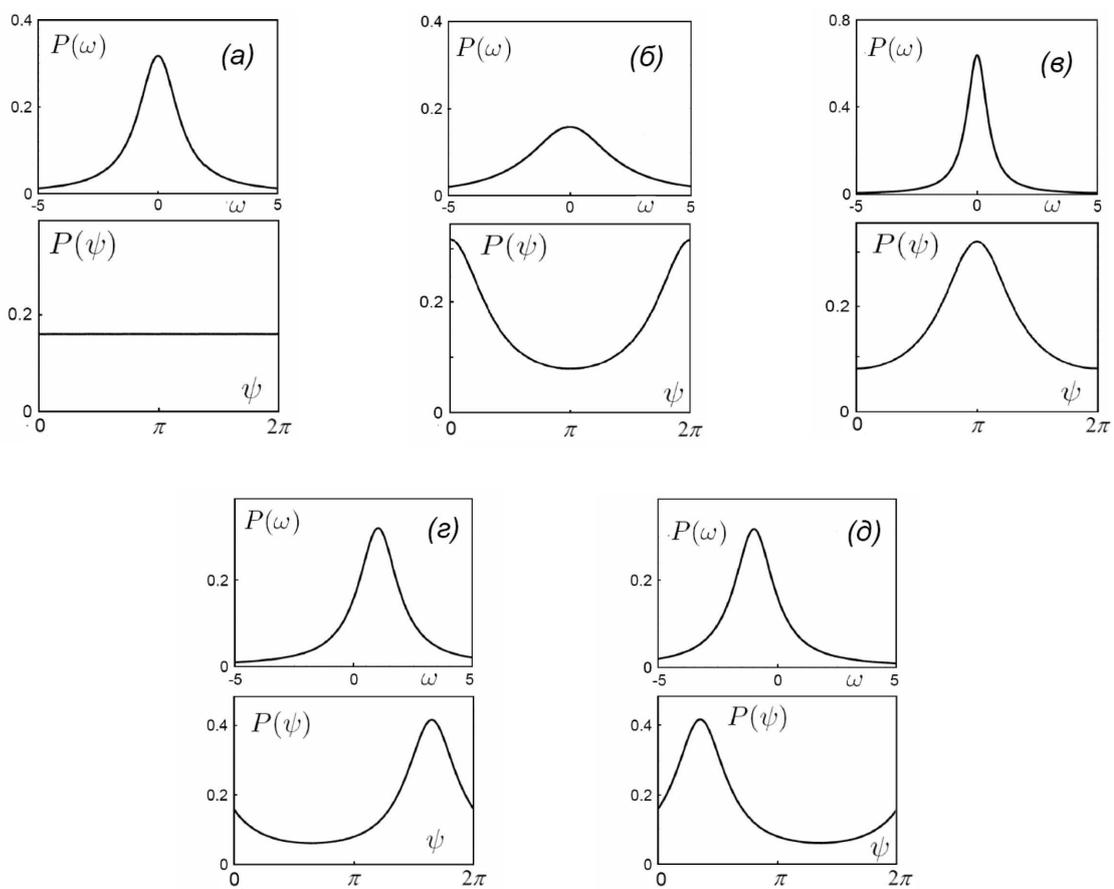


Рис. 6: Изменение распределения  $P(\psi)$  при масштабном преобразовании и трансляциях функции  $P(\omega)$ , если форма последней соответствует приближению случайных фаз.

Если масштабным преобразованием и трансляцией обеспечить максимум  $P(\omega)$  при  $\omega = 0$  с единичным значением в нем, то распределения (68–70) различаются не очень сильно (Рис.5), свидетельствуя о слабой зависимости  $P(\omega)$  от приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}}$ .

## 9. Внешнее распределение фаз

Если распределение  $P(\omega)$  известно, то его изменение при вариации граничных условий сводится к масштабному преобразованию и трансляциям. При этом изменение внешнего распределения  $P(\psi)$  на качественном уровне является легко предсказуемыми и иллюстрируются на Рис.6. Распределение  $P(\psi)$  является однородным (Рис.6,а), если  $P(\omega)$  имеет вид (68) и соответствует приближению случайных фаз. Уширение распределения  $P(\omega)$  приводит к локализации  $P(\psi)$  вблизи краев интервала  $(0, 2\pi)$ , а сужение — к локализации  $P(\psi)$  в середине интервала  $(0, 2\pi)$  (Рис.6,в). Сдвиг  $P(\omega)$  вправо или влево приводит к появлению максимума в правой или левой части интервала  $(0, 2\pi)$  (Рис.6,г,д). Если параметр  $\gamma$  отличен от  $-\pi/2$ , то происходит трансляция по  $\psi$  и представленные зависимости справедливы не в интервале  $(0, 2\pi)$ , а в интервале  $(\psi_0, 2\pi + \psi_0)$ .

Если распределение  $P(\omega)$  принимается не в виде (68), а в гауссовской форме (69), то Рис.6 качественно сохраняется, но  $P(\psi)$  не будет постоянным на Рис.6,а. Асимметрия функции  $P(\omega)$  при  $\mathcal{E} = 0$ , соответствующей критическому распределению (Рис.5), приводит к новому качественному моменту — при ее трансляциях  $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$  в некотором интервале значений  $\omega_0$  возникает двухгорбое распределение  $P(\psi)$  (Рис.7).

## 10. Внутреннее распределение фаз

Вернемся к случаю  $\beta = \pi/2$ ,  $\gamma = -\pi/2$ , рассмотренному в разд.4, и сделаем замену  $\omega = -\text{ctg } \psi/2$  в полном уравнении эволюции (31). Если типичные значения  $\rho$  достаточно велики, то уравнение эволюции для  $P(\rho, \omega)$  принимает вид

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \epsilon^2 \frac{4\omega^2}{(1+\omega^2)^2} \rho^2 P'_\rho - \Delta \frac{2\omega}{1+\omega^2} \rho P + \epsilon^2 \frac{2}{1+\omega^2} \rho P + \dots \right\}'_\rho + \epsilon^2 \left\{ P'_\omega + (b + a\omega^2) P \right\}'_\omega. \quad (71)$$

Делая замену  $\omega = s\tilde{\omega}$  и переобозначая параметры  $\tilde{a} = as^3$ ,  $\tilde{b} = bs$ ,  $\tilde{\epsilon}^2 = \epsilon^2 s^{-2}$ , имеем

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \tilde{\epsilon}^2 s^2 \frac{4s^2 \tilde{\omega}^2}{(1+s^2 \tilde{\omega}^2)^2} \rho^2 P'_\rho - \tilde{\Delta} \frac{2s\tilde{\omega}}{1+s^2 \tilde{\omega}^2} \rho P + \tilde{\epsilon}^2 s^2 \frac{2}{1+s^2 \tilde{\omega}^2} \rho P + \dots \right\}'_\rho + \tilde{\epsilon}^2 \left\{ P'_\omega + (\tilde{b} + \tilde{a}\tilde{\omega}^2) P \right\}'_\omega. \quad (72)$$

Последний член в (72) имеет тот же вид, что в (71), тогда как остальные члены не являются инвариантными. Согласно (5), параметр  $D$  определяется коэффициентом при  $\rho^2 P'_\rho$  и уравнения (71, 72) приводят к двум выражениям

$$D = 2\epsilon^2 \left\langle \frac{4\omega^2}{(1+\omega^2)^2} \right\rangle_{a,b}, \quad (73)$$

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2 s^2 \left\langle \frac{4s^2 \omega^2}{(1+s^2 \omega^2)^2} \right\rangle_{\tilde{a}, \tilde{b}}, \quad (74)$$

которые эквивалентны в силу соотношения (44). Если (74) принято в качестве определения коэффициента диффузии  $D$ , то его инвариантность относительно изменения граничных условий выполняется автоматически. Однако, замена  $a, b, \epsilon$  на  $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{\epsilon}$  в (71) приводит к аналогичным заменам в (73), что вместе с (74) дает соотношение

$$\left\langle \frac{4\omega^2}{(1+\omega^2)^2} \right\rangle_{a,b} = s^2 \left\langle \frac{4s^2 \omega^2}{(1+s^2 \omega^2)^2} \right\rangle_{\tilde{a}, \tilde{b}}, \quad (75)$$

которое не выполняется при произвольных  $s$ , но справедливо лишь при некотором "правильном" выборе масштабного фактора. Нетрудно понять, что этот "правильный" выбор соответствует "внутреннему" распределению фаз. Аналогичные соображения можно привести в отношении параметра  $v$  в распределении (6), который определяется коэффициентом при  $\rho P$ .

Пусть начальные значения  $a_0, b_0$  параметров  $a$  и  $b$  выбраны из условия  $|a_0| = |b_0|$ , которое является "естественным" вдали от края исходной зоны. Если  $P(\omega)$  — решение уравнения (41) с параметрами  $a_0, b_0$ , то замена  $\omega \rightarrow s(\tilde{\omega} + \omega_0)$  при надлежащем выборе  $s$  и  $\omega_0$  позволяет обеспечить правильные значения параметров  $D$  и  $v$ , следующие из анализа моментов. Полученное распределение  $P(\tilde{\omega})$  после возвращения к переменной  $\psi$  будет определять внутреннее распределение фаз. Поведение  $s$  и  $\omega_0$  как функции приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}}$  показано на Рис.8. Масштабный

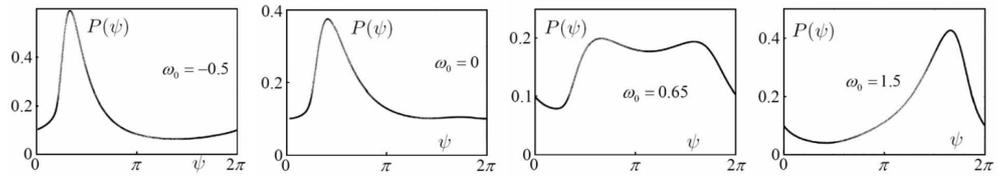


Рис. 7: Изменение распределения  $P(\psi)$  при трансляциях критического распределения  $P(\omega)$ .

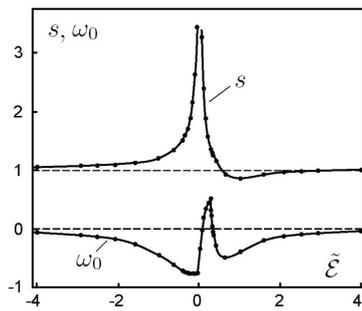


Рис. 8: Зависимость масштабного фактора  $s$  и трансляционного сдвига  $\omega_0$  от приведенной энергии  $\tilde{\epsilon}$ .

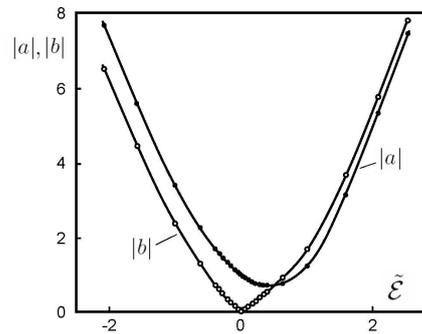


Рис. 9: Параметры  $a$  и  $b$  для внутреннего распределения фаз как функции приведенной энергии  $\tilde{\epsilon}$ .

фактор  $s$  расходуется при  $\tilde{\mathcal{E}} \rightarrow 0$ , в результате чего преобразованные параметры  $a = a_0 s^3$  и  $b = b_0 s$  уже не связаны соотношением  $|a| = |b|$  (Рис.9), которое выполняется лишь при больших  $|\tilde{\mathcal{E}}|$ , т.е. в глубине разрешенной и запрещенной зон. Физический смысл этого обстоятельства более ясен на Рис.10, показывающем зависимость энергии Ферми  $\tilde{\mathcal{E}}_{ext}$  в идеальных контактах от энергии Ферми  $\tilde{\mathcal{E}}$  в изучаемой системе. Минимум  $\tilde{\mathcal{E}}_{ext}$  достигается при значении  $\tilde{\mathcal{E}} = \tilde{\mathcal{E}}_0 = 0.28$ , которое нужно интерпретировать как перенормированную границу разрешенной зоны, сдвинутую за счет флуктуаций случайного потенциала. Этот вывод подтверждается тем, что при  $\tilde{\mathcal{E}} < \tilde{\mathcal{E}}_0$  трансляционный сдвиг  $\omega_0$  уходит в комплексную плоскость, что имеет простой физический смысл. При  $\tilde{\mathcal{E}} = \tilde{\mathcal{E}}_0$  имеем  $\tilde{\mathcal{E}}_{ext} = \tilde{\mathcal{E}}_0$  (Рис.10) и сдвинутый край зоны оказывается ниже уровня Ферми в идеальных контактах при  $\tilde{\mathcal{E}} > \tilde{\mathcal{E}}_0$  и выше при  $\tilde{\mathcal{E}} < \tilde{\mathcal{E}}_0$ . В последнем случае внутренние свойства системы описываются не истинной, а псевдо-трансферматрицей, и распределение  $P(\psi)$  становится комплексным. Детальное изучение последнего не очень интересно, поэтому при  $\tilde{\mathcal{E}} < \tilde{\mathcal{E}}_0$  в качестве "внутреннего" распределения  $P(\psi)$  мы приведем внешнее распределение, наиболее близкое к внутреннему — практически оно близко к модулю комплексного распределения  $P(\psi)$ . Последнее следует из того, что сдвиг параметра  $\omega_0$  в комплексную плоскость сравнительно мал и допускает аналитическое исследование (см. Приложение 5): это иллюстрируется рисунком 11, показывающем наилучшую подгонку параметра  $v$  (при точном воспроизведении  $D$ ), возможную при действительных  $\omega_0$ .

Эволюция внутреннего распределения  $P(\psi)$  (с указанной оговоркой) при изменении энергии  $\tilde{\mathcal{E}}$  показана на Рис.12. Первый ряд рисунков соответствует изменению  $\tilde{\mathcal{E}}$  от больших положительных значений до значения  $\tilde{\mathcal{E}} = 0.63$ , соответствующего правому минимуму  $\omega_0$  на Рис.8; при этом распределение  $P(\omega)$  близко к лоренцевской форме (68), а изменение  $P(\psi)$  связано в основном с трансляцией  $P(\omega)$  в левую сторону (Рис.6,д). Нижний ряд рисунков 12 соответствует изменению  $\tilde{\mathcal{E}}$  от больших отрицательных значений до значения  $\tilde{\mathcal{E}} = -0.10$ , соответствующего левому минимуму  $\omega_0$  на Рис.8; при этом распределение  $P(\psi)$  локализовано вблизи  $\pi/2$  и постепенно уширяется при росте  $\tilde{\mathcal{E}}$ , эволюционируя от гауссовской формы (69) к критической форме (70). Средний ряд рисунков 12 соответствует изменению  $\tilde{\mathcal{E}}$  между двумя

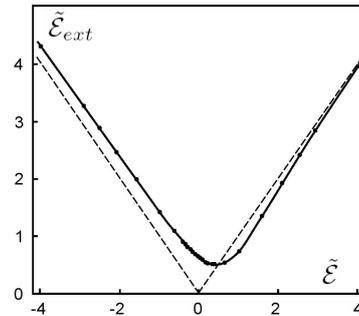


Рис. 10: Зависимость энергии Ферми  $\tilde{\mathcal{E}}_{ext}$  в идеальных контактах от энергии Ферми  $\tilde{\mathcal{E}}$  в изучаемой системе для внутреннего распределения фаз. Пунктиром показана зависимость  $\tilde{\mathcal{E}}_{ext} = |\tilde{\mathcal{E}}|$

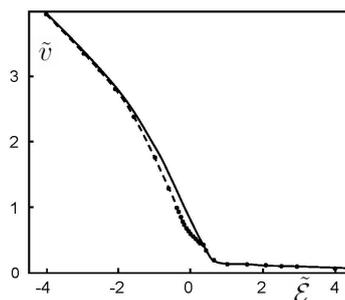


Рис. 11: Наилучшая подгонка параметра  $v$  при действительных значениях трансляционного сдвига  $\omega_0$ .

минимумами  $\omega_0$  на Рис.8; форма  $P(\omega)$  близка к критической, а изменения  $P(\psi)$  в основном определяются трансляционным сдвигом  $\omega_0$  и соответствуют Рис.7. Заметим, что четвертый и девятый графики на Рис.12 близки друг к другу, так как форма  $P(\omega)$  близка к критической, а трансляции по  $\omega$  примерно одинаковы.

Обсудим механизм реализации внутреннего распределения фаз. Как обсуждалось в [16, 20, 21], распределение ландауэровских сопротивлений  $P(\rho)$  испытывает осцилляции аperiodического характера, связанные с тем, что форма распределения  $P(\rho)$  существенно зависит от нескольких первых моментов, тогда как моменты  $\langle \rho^n \rangle$  являются осциллирующими функциями  $L$ ; при этом  $n$ -й момент определяется суперпозицией  $n$  дискретных гармоник. Относительная амплитуда осцилляций экспоненциально убывает на масштабе  $L \sim \xi$  и при больших  $L$  они несущественны. Аналогичная ситуация имеет место для полного распределения  $P(\rho, \omega)$ ; <sup>7</sup> при этом осцилляциям подвержены как среднее значение  $\omega$ , так и ширина его распределения. Поэтому как трансляционный сдвиг  $\omega_0$ , так и масштабный фактор  $s$  существенно осциллируют на масштабах  $L \lesssim \xi$ , стремясь при больших  $L$  к "правильным" значениям, которые и определяют внутреннее распределение фаз.

## 11. Заключение

В настоящей работе мы вывели уравнение эволюции для совместного распределения  $P(\rho, \psi)$  ландауэровского сопротивления  $\rho$  и фазовой переменной  $\psi$ . При больших  $L$  оно допускает разделение переменных, что обеспечивает существование стационарного распределения  $P(\psi)$ , определяющего коэффициенты в уравнении эволюции (5) для  $P(\rho)$ .

В результате проведенного анализа мы приходим к очень простой картине. Фаза  $\psi$  оказывается "плохой" переменной, а "правильной" переменной является  $\omega = -\text{ctg } \psi/2$ . Форма стационарного распределения  $P(\omega)$  определяется внутренними свойствами системы и не зависит от граничных условий. Изменение граничных условий приводят к трем эффектам: (а) масштабному преобразованию  $\omega \rightarrow s\omega$ , в основном связанному с изменением свойств идеальных контактов; (б) трансляции  $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$ , в основном определяемой наличием  $\delta$ -образного потенциала на границах системы; (в) трансляции

<sup>7</sup> Распределение  $P(\rho)$  определяется четными моментами от элементов  $T_{ij}$  трансфер-матрицы  $T$ . При анализе  $P(\rho, \omega)$  нужно рассматривать и нечетные моменты.

$\psi \rightarrow \psi + \psi_0$ , определяемой размытием границ раздела. Граничные условия существенно влияют на "внешнее" распределение фаз, которое входит в уравнения эволюции, но не влияют на предельное распределение  $P(\rho)$  в области больших  $L$ , что позволяет говорить о существовании скрытой симметрии в уравнениях эволюции. Предельное распределение  $P(\rho)$  является логнормальным, что может быть установлено при самых общих условиях <sup>8</sup>. Предельное распределение  $P(\rho)$  определяется "внутренним" распределением  $P(\psi)$ , которое получается из стационарного распределения  $P(\omega)$  при подходящем выборе масштабного фактора  $s$  и трансляционных сдвигов  $\omega_0$  и  $\psi_0$ .

Обсуждаемая проблематика не ограничена одномерными системами — аналогичные трудности возникают при анализе ляпуновских экспонент в рамках обобщенной версии [17] уравнения Дорохова–Мелло–Перейра–Кумара [28, 29]. Минимальная ляпуновская экспонента определяет критические свойства для перехода Андерсона (на этом основан известный численный алгоритм, см. ссылки в [17]), и указанная скрытая симметрия может быть существенной при исследовании последнего.

## Приложение 1. О разделении переменных в уравнении (31).

Для разделения переменных в задаче на собственные значения

$$\hat{L} P(\rho, \psi) = \lambda P(\rho, \psi) \quad (A.1)$$

оператор  $\hat{L}$  должен представляться в виде суммы двух операторов  $\hat{L}_\rho + \hat{M}_\psi$ , зависящих только от  $\rho$  и  $\psi$  соответственно. Условия для разделения переменных в уравнении (31) оказываются более слабыми. В пределе больших  $L$ , когда типичные значения  $\rho$  достаточно велики, можно положить  $R = 2$ , после чего уравнение (31) имеет структуру

$$\frac{\partial P}{\partial L} = \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}'_\rho + \left\{ \hat{M}_\psi P \right\}'_\psi. \quad (A.2)$$

Подставляя  $P = P(\rho)P(\psi)$  и разделив на  $P(\rho)$ , имеем

$$-\frac{\partial P(\psi)}{\partial L} + \left\{ \hat{M}_\psi P(\psi) \right\}'_\psi = \quad (A.3)$$

<sup>8</sup> Более точно, мы рассматривали случайный потенциал малой амплитуды с короткодействующими корреляциями для энергий вблизи края исходной зоны. Если энергия сравнима с шириной зоны, то возникают эффекты соизмеримости фермиевского импульса  $\bar{k}$  с постоянной решетки  $a_0$  [22, 23], что может приводить к усложнению ситуации [24, 25].

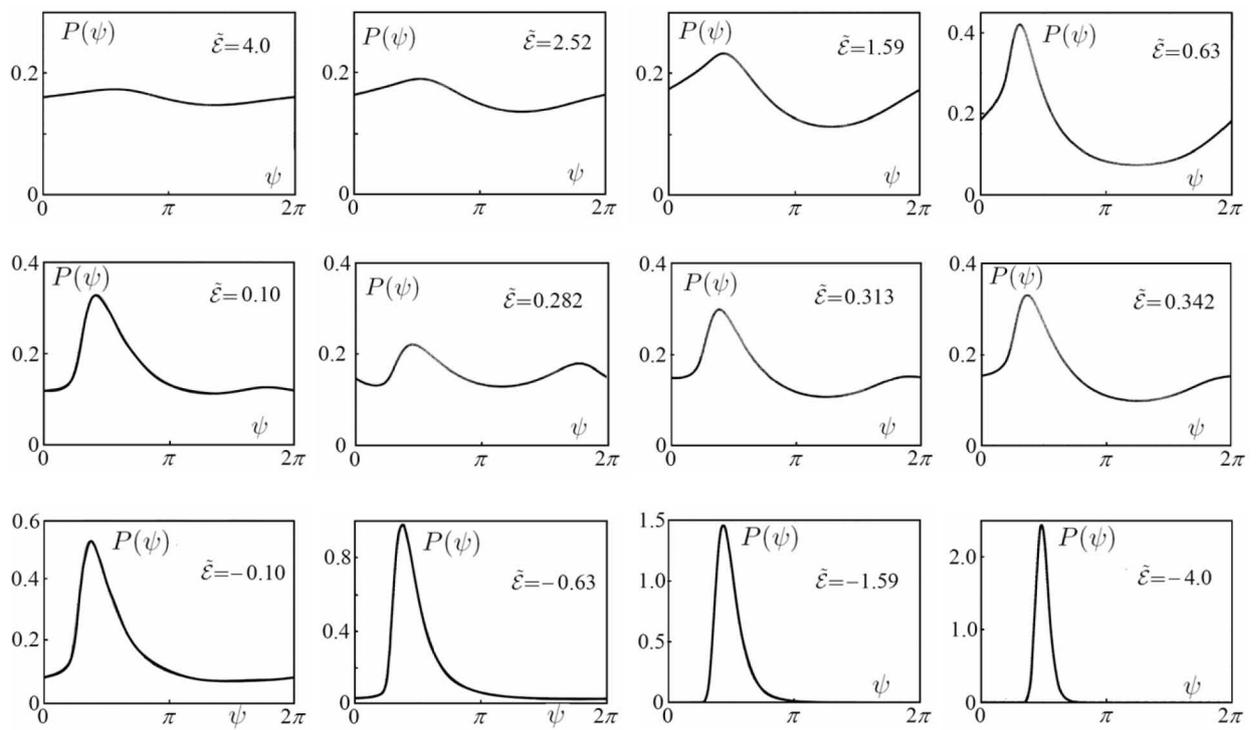


Рис. 12: Эволюция внутреннего распределения фаз при изменении приведенной энергии  $\tilde{\mathcal{E}}$ .

$$= \frac{P(\psi)}{P(\rho)} \frac{\partial P(\rho)}{\partial L} - \frac{1}{P(\rho)} \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}'.$$

Левая часть не зависит от  $\rho$  и есть некоторая функция  $F(\psi)$ . Тогда

$$P(\psi) \frac{\partial P(\rho)}{\partial L} - \left\{ \hat{L}_{\rho, \psi} P \right\}' = F(\psi) P(\rho) \quad (A.4)$$

и интегрируя по  $\rho$  получим  $F(\psi) \equiv 0$ , т.к. левая часть обращается в нуль, а интеграл от  $P(\rho)$  равен единице в силу нормировки. В результате правая и левая части уравнения (A.3) обращаются в нуль независимо друг от друга, и уравнение для  $P(\psi)$  отщепляется. При этом средние от тригонометрических функций  $\psi$ , входящие в (34, 35), определяются стационарным распределением  $P(\psi)$ , удовлетворяющим уравнению (33).

### Приложение 2. Краевые матрицы для размытой границы раздела

Краевые матрицы для модели, представленной на Рис.4, могут быть выбраны в виде

$$T_l = \begin{pmatrix} e^{ikd_1} & 0 \\ 0 & e^{-ikd_1} \end{pmatrix} T_a \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} T_c \quad (A.5)$$

$$T_r = T_{\bar{c}} \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_2} \end{pmatrix} T_{\bar{a}} \begin{pmatrix} e^{ikd_2} & 0 \\ 0 & e^{-ikd_2} \end{pmatrix},$$

где

$$T_a = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix}, \quad a_1 = \frac{k + k_1}{2k}, \quad a_2 = \frac{k - k_1}{2k},$$

$$T_c = \begin{pmatrix} c & c^* \\ c^* & c \end{pmatrix}, \quad c = \frac{ik_1 + \kappa}{2ik_1}, \quad (A.6)$$

$$T_{\bar{a}} = \begin{pmatrix} \tilde{a}_1 & \tilde{a}_2 \\ \tilde{a}_2 & \tilde{a}_1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{a}_1 = \frac{k_1 + k}{2k_1}, \quad \tilde{a}_2 = \frac{k_1 - k}{2k_1},$$

$$T_{\bar{c}} = \begin{pmatrix} \tilde{c} & \tilde{c}^* \\ \tilde{c}^* & \tilde{c} \end{pmatrix}, \quad \tilde{c} = \frac{\kappa + ik_1}{2\kappa},$$

Сравнение с [16] показывает, что  $T_a$  и  $T_{\bar{a}}$  — это краевые матрицы для границы раздела двух металлов, а  $T_c$  и  $T_{\bar{c}}$  — краевые матрицы для границы раздела металл-диэлектрик.

Составляя произведение  $T_l T_r$ , заметим, что соотношения  $T_c T_{\bar{c}} = 1$  и  $T_a T_{\bar{a}} = 1$  приводят к существенным упрощениям и при условии (57) произведение сводится к единичной матрице.

Для вычисления  $T_\epsilon$  запишем

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + T_l \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} T_r$$

и воспользуемся тем, что

$$T_c \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} T_{\bar{c}} = \frac{\kappa}{ik_1} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_1} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_1 d_2} & 0 \\ 0 & e^{ik_1 d_2} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 1 & e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & -1 \end{pmatrix} \quad (A.8)$$

$$T_a \begin{pmatrix} 1 & e^{i\alpha} \\ -e^{-i\alpha} & -1 \end{pmatrix} T_{\bar{a}} = \begin{pmatrix} \mathcal{R} & \mathcal{R} + i \sin \alpha \\ -\mathcal{R} + i \sin \alpha & -\mathcal{R} \end{pmatrix},$$

после чего соотношение  $\mathcal{P}^2 = \mathcal{Q}^2 + 1$  позволяет привести  $T_\epsilon$  к виду (18).

### Приложение 3. Степень произвола для краевых матриц

Принимая краевые матрицы  $T_l$  и  $T_r$  в виде (60), потребуем, чтобы матрица  $T_\delta = T_l t_\delta T_r$  была истинной трансфер-матрицей, удовлетворяющей соотношениям (61); последние достаточно наложить при малых  $\delta$ , что приводит к условиям

$$ad + bc + a^* d^* + b^* c^* = 0 \quad ab + c^* d^* = 0. \quad (A.9)$$

Первое из них вместе с условием на детерминант (60) приводит к более простым соотношениям

$$\operatorname{Re} ad = 1, \quad \operatorname{Re} bc = -1. \quad (A.10)$$

Полагая

$$a = |a|e^{i\alpha}, \quad b = |b|e^{i\beta}, \quad c = |c|e^{i\gamma}, \quad d = |d|e^{i\delta}, \quad (A.11)$$

получим полный набор условий

$$2|b||c| \cos(\beta + \gamma) = -1, \\ 2|a||d| \cos(\alpha + \delta) = 1, \\ |a||b| = |c||d|, \quad (A.12) \\ e^{i\alpha + i\beta + i\gamma + i\delta} = -1,$$

$$|a||d| \sin(\alpha + \delta) - |b||c| \sin(\beta + \gamma) = 0.$$

Нетрудно видеть, что  $\sin(\alpha + \delta) = \sin(\beta + \gamma)$ ,  $\cos(\alpha + \delta) = -\cos(\beta + \gamma)$ ; тогда из последнего соотношения имеем  $|a||d| = |b||c|$ , что вместе с третьим соотношением дает  $|a| = |c|$ ,  $|b| = |d|$ . В результате, условие того, что  $T_\delta$  является истинной трансфер-матрицей, определяет 4-параметрический произвол для матрицы  $T_l$

$$T_l = \begin{pmatrix} |a|e^{i\alpha} & |b|e^{i\beta} \\ |a|e^{i\gamma} & |b|e^{i\delta} \end{pmatrix},$$

$$e^{i\alpha + i\beta + i\gamma + i\delta} = -1, \quad 1 = -2|a||b| \cos(\beta + \gamma). \quad (A.13)$$

Вычисляя матрицу  $T_\epsilon$

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 - \bar{\epsilon}(a-b)(c-d) & \bar{\epsilon}(a-b)^2 \\ -\bar{\epsilon}(c-d)^2 & 1 + \bar{\epsilon}(a-b)(c-d) \end{pmatrix}, \quad (A.14)$$

и требуя, чтобы она была истинной трансфер-матрицей, получим

$$\begin{aligned} (a-b)(c-d) + (a^* - b^*)(c^* - d^*) &= 0, \\ (a-b)^2 + (c^* - d^*)^2 &= 0, \end{aligned} \quad (A.15)$$

Полагая

$$(a-b) = r e^{i\theta/2}, \quad (c-d) = r_1 e^{i\varphi/2}, \quad (A.16)$$

получим  $r = r_1$ ,  $\varphi = \pi - \theta + 2\pi n$ , так что

$$T_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 - i\bar{\epsilon}r^2(-1)^n & \bar{\epsilon}r^2 e^{i\theta} \\ \bar{\epsilon}r^2 e^{-i\theta} & 1 + i\bar{\epsilon}r^2(-1)^n \end{pmatrix}, \quad (A.17)$$

где  $n$  — целое. Замечая, что

$$\begin{aligned} r^2 &= |a-b|^2 = |a|^2 + |b|^2 - 2|a||b| \cos(\alpha - \beta), \\ r^2 &= |c-d|^2 = |a|^2 + |b|^2 - 2|a||b| \cos(\gamma - \delta), \end{aligned} \quad (A.18)$$

имеем  $(\alpha - \beta) = \pm(\gamma - \delta) + 2\pi k$ . При верхнем знаке получим противоречие, так как  $\beta + \gamma = \pi/2 + \pi k$  и левая часть первого соотношения (A.12) обращается в нуль. При нижнем знаке имеем  $\gamma = \pi/2 - \alpha + \pi k$ ,  $\delta = \pi/2 - \beta + \pi k'$ , где  $k$  и  $k'$  выбираются четными при  $\sin(\beta - \alpha) > 0$  и нечетными в обратном случае. В результате для матрицы  $T_l$  приходим к представлению (62) с трехпараметрическим произволом. При четных  $k$ ,  $k'$  имеем четное  $n$  в выражении (A.17) для  $T_\epsilon$ , в результате чего оно сводится к (18) с параметрами  $K$  и  $\gamma$ , определенными в (63). При нечетных  $k$ ,  $k'$  имеем нечетное  $n$  в (A.17), и приведение к форме (18) производится путем несущественного изменения знака  $\bar{\epsilon}$ .

#### Приложение 4. Распределение $P(\omega)$ при $\mathcal{E} = 0$

Дифференцируя (41) и предполагая при  $\omega \rightarrow \infty$  степенную асимптотику  $P(\omega) \sim \omega^{-\alpha}$ , получим  $\alpha = 2$ . Вычисляя поправки к асимптотике в виде ряда по обратным степеням  $\omega$ ,

$$P(\omega) = \omega^{-2} \sum_{n=0}^{\infty} A_n \omega^{-n}, \quad (A.19)$$

имеем рекуррентную

$$\begin{aligned} A_0 &= 1, \quad A_1 = 0, \quad A_2 = -b/a, \\ aA_{n+1} &= -bA_{n-1} + nA_{n-2}, \quad n \geq 2. \end{aligned} \quad (A.20)$$

Для критического распределения ( $\mathcal{E} = 0$ ) имеем  $b = 0$ , и коэффициенты ряда находятся в явном виде

$$P(\omega) = \frac{1}{\omega^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+2/3)}{\Gamma(2/3)} \left( \frac{3}{a\omega^3} \right)^k. \quad (A.21)$$

Расходящийся ряд можно просуммировать по Борелю [26], записывая гамма-функцию  $\Gamma(k+2/3)$  в виде представляющего ее интеграла и суммируя возникающую геометрическую прогрессию. Полагая  $a = -1$  и вводя нормировочный множитель, получим (70).

Выражения (A.19), (A.20) полезны при численном интегрировании уравнения (41) при произвольных  $b$ . При  $|\omega| > 5$  функция  $P(\omega)$  хорошо аппроксимируется рядом (A.19), понимаемом в асимптотическом смысле и суммируемом до минимального члена. Такую аппроксимацию можно использовать в качестве начального условия при больших положительных  $\omega$  и интегрировать в сторону уменьшения  $\omega$ .<sup>9</sup> При использовании стандартных программ с контролем точности [27] решение автоматически выходит на правильную асимптотику при  $\omega \rightarrow -\infty$ .

#### Приложение 5. Поведение $s$ и $\omega_0$ в запрещенной зоне

В глубине запрещенной зоны константа  $C_0$  в (41) экспоненциально мала и распределение  $P(\omega)$  можно принять в виде

$$P(\omega) = \text{const} \exp \{ -b\omega - a\omega^3/3 \}. \quad (A.22)$$

При  $-a = b \gg 1$  распределение имеет максимум при  $\omega = -1$ , в окрестности которого оно сводится к гауссовой форме (69). Вычисление средних в (38) дает

$$\begin{aligned} \langle \sin \psi \rangle &= \left\langle -\frac{2\omega}{1+\omega^2} \right\rangle \approx \left\langle 1 - \frac{\tilde{\omega}^2}{2} \right\rangle = 1 - \frac{1}{4|a|}, \\ \langle \sin^2 \psi \rangle &= \left\langle \frac{4\omega^2}{(1+\omega^2)^2} \right\rangle \approx \langle 1 - \tilde{\omega}^2 \rangle \approx 1, \\ \langle \cos \psi \rangle &= \left\langle \frac{\omega^2 - 1}{1+\omega^2} \right\rangle \approx \langle -\tilde{\omega} \rangle \approx 0, \end{aligned} \quad (A.23)$$

так что для параметров  $D$  и  $v$  имеем

$$D = 2\tilde{\epsilon}^2, \quad v = 2\delta - \tilde{\epsilon}^2, \quad (A.24)$$

<sup>9</sup> При интегрировании в сторону увеличения  $\omega$  возникают неустойчивости, связанные с наличием растущей экспоненты, являющейся решением (41) при  $C_0 = 0$ .

что в пределах точности согласуется с результатами из анализа моментов [16]; здесь  $\tilde{\omega}$  — отклонение от максимума и учтено, что при  $|a| = |b|$  параметр  $\epsilon$  сводится к  $\bar{\epsilon}$ .

Чтобы воспривести  $D$  и  $v$  с более высокой точностью, произведем масштабное преобразование и трансляцию распределения (A.22) с  $-a = b$ ; тогда для  $s = 1 - \tilde{s}$ ,  $\omega_0 = \tilde{s} + \tilde{\omega}_0$  и  $\tilde{s}, \tilde{\omega}_0 \ll 1$  получим

$$D = 2\bar{\epsilon}^2 (1 + 2\tilde{s} - \bar{\epsilon}^2/\delta), \quad (A.25)$$

$$v = 2\delta - \bar{\epsilon}^2 + (\tilde{s}^2 - \tilde{\omega}_0^2) \delta - \bar{\epsilon}^2 (\tilde{\omega}_0 + 2\tilde{s} + \bar{\epsilon}^2/\delta),$$

где учтены сдвиг максимума распределения и слабое отклонение от гауссовской формы. Сопоставляя с результатами из анализа моментов [16]

$$D = 2\bar{\epsilon}^2 - \frac{15}{2} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\delta}, \quad v = 2\delta - \bar{\epsilon}^2 + \frac{27}{4} \frac{\bar{\epsilon}^2}{\delta}, \quad (A.26)$$

и учитывая, что  $\delta/\bar{\epsilon}^2 = 4|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}$ , получим

$$s = 1 + \frac{11}{32} \frac{1}{|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}}, \quad \omega_0 = \frac{-15 \pm i\sqrt{183}}{32|\tilde{\mathcal{E}}|^{3/2}}, \quad (A.27)$$

что объясняет поведение кривых в левой части Рис.8. Трансляционный сдвиг  $\omega_0$  оказывается комплексным; для гауссовского распределения легко проверить, что при  $|\omega_0| \ll 1$  пренебрежение мнимой частью  $\omega_0$  соответствует переходу к модулю комплексного распределения  $P(\omega)$ .

## Список литературы

- [1] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, D. S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).
- [2] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); Phil. Mag. **21**, 863 (1970).
- [3] В. И. Мельников, ФТТ **23**, 782 (1981).
- [4] A. A. Abrikosov, Sol. St. Comm. **37**, 997 (1981).
- [5] N. Kumar, Phys. Rev. B **31**, 5513 (1985).
- [6] B. Shapiro, Phys. Rev. B **34**, 4394 (1986).
- [7] P. Mello, Phys. Rev. B **35**, 1082 (1987).
- [8] B. Shapiro, Phil. Mag. **56**, 1031 (1987).
- [9] И. М. Суслов, ЖЭТФ **151**, 897 (2017).
- [10] И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, Москва, Наука, 1982.
- [11] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).
- [12] X. Chang, X. Ma, M. Yezpez, A. Z. Genack, P. A. Mello, Phys. Rev. B **96**, 180203 (2017).
- [13] L. I. Deych, D. Zaslavsky, A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **81**, 5390 (1998).
- [14] L. I. Deych, A. A. Lisyansky, B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **84**, 2678 (2000); Phys. Rev. B **64**, 224202 (2001).
- [15] L. I. Deych, M. V. Erementchouk, A. A. Lisyansky, Phys. Rev. Lett. **90**, 126601 (2001).
- [16] И. М. Суслов, ЖЭТФ **156**, 950 (2019).
- [17] И. М. Суслов, ЖЭТФ **154**, 152 (2018).
- [18] В. Л. Березинский, Л. П. Горьков, ЖЭТФ **77**, 2498 (1979).
- [19] P. Markos, Acta Physica Slovaca **56**, 561 (2006).
- [20] V. V. Brazhkin, I. M. Suslov, J. Phys. – Cond. Matt. **32** (35), 35LT02 (2020).
- [21] И. М. Суслов, ЖЭТФ **158**, 911 (2020).
- [22] M. Karpus, F. Wegner, Z. Phys. B **45**, 15 (1981).
- [23] V. E. Kravtsov, V. I. Yudson, Ann. Phys. (NY) **326**, 1672 (2011).
- [24] H. Schomerus and M. Titov, Phys.Rev. B **67**, 100201(R) (2003).
- [25] L. I. Deych, M. V. Erementchouk, A. A. Lisyansky, B. L. Altshuler, Phys.Rev.Lett. **91**, 096601 (2003).
- [26] И. Харди, Расходящиеся ряды, Москва, ИИЛ, 1951.
- [27] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Wetterling, Numerical Recipes in Fortran, Cambridge University Press, 1992.
- [28] О. Н. Дорохов, Письма в ЖЭТФ **36**, 259 (1982).
- [29] P. A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar, Ann. Phys. (N.Y.) **181**, 290 (1988).