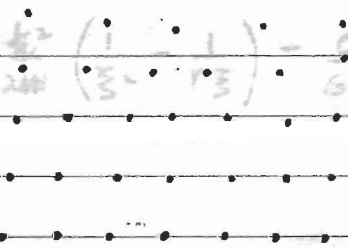
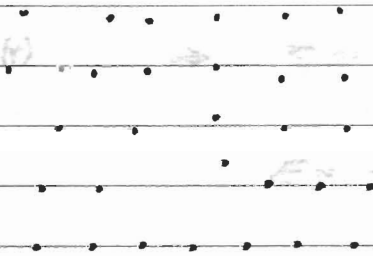
נבחן כעת להבין מספר אפקטים הנובעים מהמצאותו של אי סדר במערכת הגבישית.

מקורו של האי סדר יכול לנבוע ממספר גורמים לדוגמא פגמים במבנה המחזורי האידאלי של השריג



דיסלוקציה



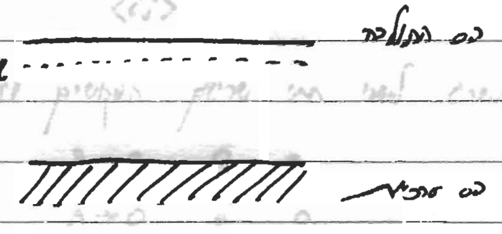
ויקנסיה

או נוכחות אטומים או יונים מסוג שונה מזה של השריג שהם הנמצאים בתוכו או בקרבתו. במקרים הללו חסר הסדר איזוטרופי למערכת ובמקרים אלו קיים מצב נוסף תחום בתוך המערכת כמו במקרה של donors או acceptors בגבישים מוליכים. לדוגמא אטום זרחן שהוא donor (נותן להעביר אלקטרון אחד) בתוך סיליקון $E_g \approx 1.12\ eV$. המערכת מתוארת באופן אפקטיבי כאטום מימן: בקירוב "המסה האפקטיבית":

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2-\frac{e^2}{\epsilon r}\right]\psi(r)=E_d\psi(r)$$

המסה האפקטיבית בתחתית פס ההולכה

נוצר מצב קשור עם אנרגית קשר ביחס לתחתית פס ההולכה של עשרות meV במקרה של זרחן בסיליקון



לכן כל עוד $T<T_d=\frac{44\,meV}{k_B}\approx 500K$ האלקטרונים יהיו על הזרחנים ומעבר לפס ההולכה יהיו מעטים (ב $T>T_d$ עוברים לפס ההולכה והם מוליכים גם כן) ומתקבלת קבוצה רק בין עצמם של הזרחנים

מכיון שפונקציות הגל של רמות המזהמים דועכות אקספוננציאלית:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{e^2}{\epsilon r}\right]\psi(r)=E\psi(r) \qquad \text{עבור} \quad \psi(r)\propto e^{-\frac{r}{\xi}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\xi^2}-\frac{1}{r\xi}\right)-\frac{e^2}{\epsilon r}\right]\psi(r)=E\,\psi(r) \quad \Rightarrow \quad \xi=\frac{\hbar^2\epsilon}{2m e^2}$$

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$$

החפיפה בין פונקציות גל של שתים ב $\vec{r}_i$ וב $\vec{r}_j$ נותנת את אמפליטודת המעבר ביניהם דועכת אקספוננציאלית

$$I_{ij}\propto e^{-\frac{|r_i-r_j|}{\xi}}$$

אם נניח שהם מסודרים כמו הקלציה ומסתכלים על דרכי המעבר מתואר ע"י

$$H=E_d\sum_i c_i^\dagger c_i+\sum_{ij} I_{ij}\,c_i^\dagger c_j$$

במודל לצורך מניחים כי המזהמים נמצאים בסריג מסודר אך שאמפליטודת המעבר ביניהם רנדומלית ומשמעותית רק בין שכנים קרובים (כמו כן במודל $E_d=0$)

$$H=\sum_{\langle ij\rangle} I_{ij}\,c_i^\dagger c_j$$

במודל זה קיימת סימטריה מכיון שניתן לחלק את הסריג לשני תתי סריגים המקושרים ביניהם על ידי H אך לא בעצמם

B → • o •

A → o • o

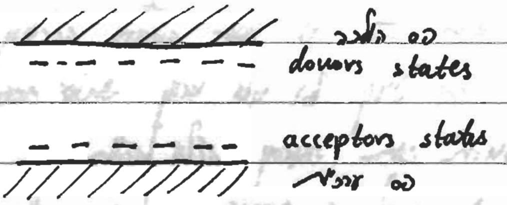
• o •

$$H=\begin{pmatrix}0 & H_{ab}\\ H_{ba} & 0\end{pmatrix} \qquad H_{ab}=H_{ba}^\dagger$$

$$H\begin{pmatrix}\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_{ab}\psi_b\\ H_{ba}\psi_a\end{pmatrix}=\varepsilon\begin{pmatrix}\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}$$
אם $\begin{pmatrix}\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}$ הוא פתרון למשוואות שרדינגר עם אנרגיה ε

$$H\begin{pmatrix}-\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}H_{ab}\psi_b\\ -H_{ba}\psi_a\end{pmatrix}=\varepsilon\begin{pmatrix}\psi_a\\ -\psi_b\end{pmatrix}=-\varepsilon\begin{pmatrix}-\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}$$
כך לכאורה $\begin{pmatrix}-\psi_a\\ \psi_b\end{pmatrix}$ גם הוא פתרון עם אנרגיה $-\varepsilon$ כי

במציאות נמצאים "מקוזזים" compensated semiconductors שמכילים N_d מסוג donors ו N_a מצמדים מסוג acceptors עם $N_d > N_a$



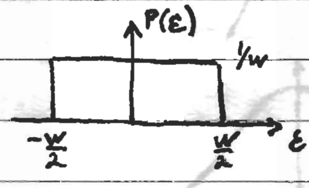
כך ש N_a אלקטרונים עוברים מ donors ל acceptors ו $N_d - N_a$ donors נשארים ריקים ומשרים פוטנציאל חשמלי אקראי (כתוצאה ממיקומם האקראי).

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_i + \sum_{ij} I_{ij} c_i^+ c_j$$

c_i^+ יוצר אלקטרון על ה donor state ה i: I_{ij} ו ε_i קבועים.

אנדרסון הבין את השקילות בגלל ה hopping והניח כי מעבר קיים רק בין שכנים קרובים. התוצאה עתה כ מודל אנדרסון

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^+ c_i + I \sum_{ij} c_i^+ c_j$$



האנרגיות ε_i מתפלגות אקראית ואנדרסון הניח

עבור $W=0$ אין אי-סדר ומצבי האלקטרונים הינם פונקציות בלוך המתפרשות על פני הגביש כולו. המערכת לכן מוליכה.

עבור $W \ll I$ פונקציות בלוך מתפזרות חלש מהפוטנציאל האקראי ונראה כי עבור W קטן מספיק הן תשארנה פרושות על פני המערכת כולה. נראה כי זהו המצב בשלושה ממדים אך לא בשניים או בממד אחד.

נתבונן כעת בגבול ההפוך. אם $I=0$ כל המצבים ממוקמים והמערכת מבודדת. מה קורה בגבולות אמצעיים? מעבר סדר $W \gg I$. נתבונן בתורת ההפרעות מסדר ראשון ב $\frac{I}{W}$. בסדר זה פונקציות המצבים הינן

$$|i\rangle + \sum_{j} \frac{I}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} |j\rangle$$

(j שכן קרוב של $|i\rangle$)

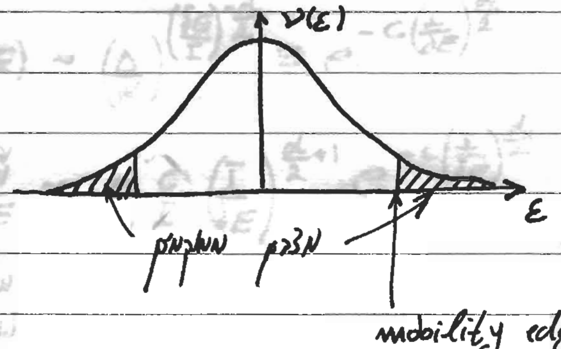
תורת ההפרעות תקפה כל זמן האבר השני קטן. מכיוון שהאנרגיות ϵ_i אקראיות נשאל לגבי את הזוג באיבר ההפרעתי בלבד. הערך האופייני של $|\epsilon_i-\epsilon_j|$ הוא $\frac{W}{2}$ ולכן נקבל כי תורת ההפרעות תקפה כל עוד $\frac{2zI}{W} < 1$ כאשר z הוא מספר השכנים הקרובים של כל i - ולכן מספר האיברים התורמים לסכום. בכל זאת טיעון זה לא מלא מכיוון שתמיד תהיה קיימת סבירות לאתר ש $\epsilon_i-\epsilon_j$ יהיה קטן. למרות זאת אנדרסון הצליח להראות כי תורת ההפרעות מתכנסת בהסתברות המתקרבת ל 1 בגבול התרמודינמי. לכן בתחום $\frac{I}{W} \ll 1$ המצבים ממוקמים והמערכת מבודדת.

שימו לב: אין זה מבטיח כי המערכת לא מוליכה יהיו מצבים ממוקמים. מה שכן מבטיח הוא הטענה שעבור אי הסדר חזק מספיק כל המצבים ממוקמים!

מסתבר כי במימד אחד ושניים כל המצבים ממוקמים (במודל אנדרסון) עבור כל W סופי

מצב ממוקם - מצב שעבור $\psi(x) \sim e^{-\frac{x}{\xi}}$ עבור x מספיק גדול ($x > \xi$).

בשלושה מימדים עבור אי סדר קטן מספיק אין מעבר בלכידת המצבים



נמצא כי מצבים ממוקמים יהיו בקצה הפס בזמן שהמצבים במרכז הפס ישארו פרושים על כל הדוגמא.

עבור הראשונים האנרגיה הפוטנציאלית דומיננטית

עבור האחרונים האנרגיה הקינטית דומיננטית

זנבות המצבים הלוקליזציה בקצה הפס יכולה להיות מוסברת על ידי ארגומנט הטיעון הבא שנקרא Lifshitz (ולכן הזנב של צפיפות המצבים במקרה זה נקרא Lifshitz tail)

$E_{min} = -2dI - \frac{W}{2}$

במודל אנדרסון אין מצבים מתחת ל זו האנרגיה אם כל האתרים הם עם $\epsilon_i = -\frac{W}{2}$

תואמת גם התחלה של d מימדי tight binding model k $E = 2I\sum_{i=1}^{d}\cos(k_i a)$

נתבונן כעת במצב ליד E_{min} הפרוש על פני N אתרים. כדי שהאנרגיה של מצב כזה תהיה קרובה ל E_{min} נדרוש שהאנרגיה של כל אחד מ N האתרים הנ"ל תהיה בתחום $\left[-\frac{W}{2}, -\frac{W}{2}-\Delta\right]$

ההסתברות לקבל קונפיגורציה כזו של מצבים היא $\left(\frac{\Delta}{W}\right)^N$

האנרגיה הקינטית המינימלית של מצב כזה היא
$$E_{min} \simeq 2I\sum_{i=1}^{d}\cos(k_i a)$$
כאשר $k_i = \frac{\pi}{a} - \frac{2\pi}{N_i a}$ עם N_i מספר האתרים בכיוון i

באופן ממוצע $N_i \sim N^{1/d}$ ולכן
$$E_{min} \simeq 2Id\cos\left(\pi - \frac{2\pi}{N^{1/d}}\right)$$
$$\simeq -2Id + (2\pi)^2 Id\, N^{-\frac{2}{d}} = E_{min} + \delta E$$

לכן מצב הנמצא באנרגיה δE מעל E_{min} פרוש במינימום על
$$N \sim \left(\frac{\delta E}{I}\right)^{-\frac{d}{2}}$$
אתרים

וההסתברות לקבל מצב כזה הוא לכן
$$P(\delta E) \sim \left(\frac{\Delta}{W}\right)^{\left(\frac{\delta E}{I}\right)^{-\frac{d}{2}}} \equiv e^{-c\left(\frac{I}{\delta E}\right)^{\frac{d}{2}}}$$

וצפיפות המצבים
$$\frac{dN}{dE} \sim \frac{d}{2}\frac{c}{I}\left(\frac{I}{\delta E}\right)^{\frac{d}{2}+1} e^{-c\left(\frac{I}{\delta E}\right)^{\frac{d}{2}}}$$

מספר המצבים לא מספר האתרים

כלומר יש ב-$\delta E \to 0$ עם essential singularity

ראינו כי בשלושה ממדים עבור אי-סדר גדול כל המצבים ממוקמים ואילו עבור אי-סדר קטן המצבים במרכז הפס ממשיכים להיות פרושים על פני כל הדגמא. כשמגדילים את אי הסדר ה mobility edge יזוזו לכיוון מרכז הפס ונצפה כי בערך קריטי של אי הסדר או ליתר דיוק של $X \equiv \frac{W}{I}$ כל המצבים יהפכו למקומיים! בערך זה של X המערכת נמצאת במעבר מתכת-מבודד. ננסה להעריך את X_0 הערך הקריטי של X בו מתרחש המעבר.

לשם כך ננסה להבין מדוע מעבר של לוקליזציית אנדרסון המופיע ב $d=3$ אך לא ב $d=1,2$.

נתבונן בהמילטוניאן אנדרסון של שני אתרים

$$H=\begin{pmatrix} \epsilon_1 & I \\ I & \epsilon_2 \end{pmatrix}$$

אשר קל לפתרון:

$$\det(\epsilon-H) = (\epsilon-\epsilon_1)(\epsilon-\epsilon_2)-I^2=0$$

$$\epsilon_\pm = \frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2}\right)^2-\epsilon_1\epsilon_2+I^2}$$

$$= \frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_1-\epsilon_2}{2}\right)^2+I^2}$$

עם המצבים העצמיים

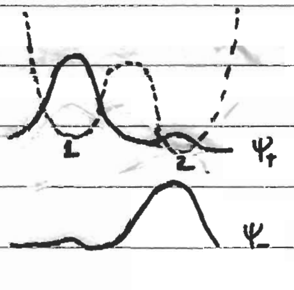
$$\Psi_\pm = N_\pm \begin{pmatrix} I \\ \epsilon_\pm-\epsilon_1 \end{pmatrix}$$

נרמול

בגבול $I \ll |\epsilon_1-\epsilon_2|$

$$\Psi_+ = \Psi_1 + \frac{I}{\epsilon_1-\epsilon_2}\Psi_2$$

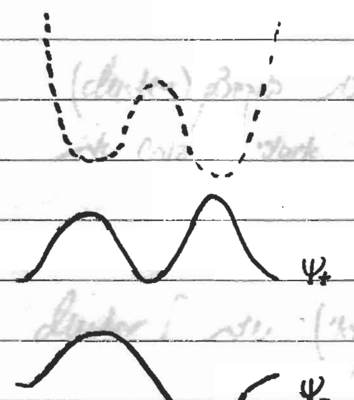
$$\Psi_- = \Psi_2 + \frac{I}{\epsilon_2-\epsilon_1}\Psi_1$$



המצבים מאופיינים להיות ממוקמים בקירוב על כל אחד מהאתרים

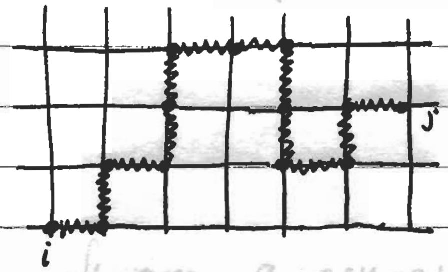
ואילו בגבול $I \gg |\epsilon_1-\epsilon_2|$

$$\Psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 \pm \Psi_2)$$



זהו מצב של רזוננס: הפרש האנרגיה בין המצבים קטן מ $I=\frac{\hbar}{\tau}$ שהוא מדד לקצב המעבר בין המצבים. במקרה זה האלקטרון "מרוח" על פני שני האתרים.

נבנה כעת למודל אנדרסון על שריג תלת-מימדי וננסה להעריך את הנקודה הקריטית X_c עבורה מתקיים מעבר מוליך-מבודד. ננסה לעשות זאת ע"י מיפוי הבעיה לבעיה קלאסית של פרקולציה. בשלב כעת אנו מתעלמים מאינטרפרנציה בין מסלולים שונים ומוגבלים ($d=3$) לפרקולציה.
נניח כי המעבר מתקיים כאשר קיים מצב הפורש את הדוגמא כולה והמעבר עקב המצאות של מספיק צמדי מצבים המתאימים ברזוננס.
נתבונן בכסם אנרגיה ברוחב $I \sim \Delta$ סביב אנרגיה $\varepsilon=0$ (שם אנו מצפים למצוא את המצב הלא מקומי הראשון) ונסמן בנקודה שחורה כל נקודת שריג שהאנרגיה שלה נמצאת בתחום $-\frac{\Delta}{2} < \varepsilon_j < \frac{\Delta}{2}$. אם האנרגיה של האתר נמצאת מחוץ לתחום זה נסמן את נקודת השריג בנקודה לבנה. היחס בין שחורות ללבנות: $X = \frac{\Delta}{W}$.



הקריטריון לדה-לוקליזציה הינו שניתן לעבור מנקודה i על שפת הדגם לנקודה j על שפתו האחרת של הדגם רק דרך נקודות שחורות.
במילים אחרות אנו מוצאים כי הנקודות הללו מתקיימות מעבר ע"י מעבר רזוננטי מאתר אחד למשנהו (ניתן להראות כי לקיחה בחשבון של מעברים לא רזוננטיים אינה משנה התוצאה המתקבלת באופן מהותי).

הגדרות לבעיית <u>פרקולציה</u>:

נתון שריג. ההסתברות שנקודת שריג שחורה: X
ההסתברות שנקודת שריג לבנה: $1-X$

כשנגדיל את X הנקודות השחורות שבהתחלה היו מבודדות מתקבצות במקבצים (clusters) בגודל הולך וגדל. בשלב מסוים $X=X_c$ נוצר cluster בגודל אינסופי: פורש את הדגם מצד אחד לשני (אנו עוסקים בגבול התרמודינמי).

נגדיר $P(X)$: ההסתברות שנקודת שריג נתונה (שנבחרה באקראי) שייכת ל-cluster אינסופי.

תורת הפרקולציה קודמת (תוצאות ידועות ממנה)

$$P(X) = \begin{cases} 0 & X<X_c \\ (X-X_c)^{\beta} & X>X_c \end{cases}$$

(ליד X_c):

מעריך (אקספוננט) קריטי

כמו הערך של X_c ו- β מקבלים מהדמיות נומריות למעט מספר מקרים בודדים בהן קיימות תוצאות אנליטיות:

(2d)	שריג משולשי	$X_c=0.5$	$\beta=5/36$	(CFT)
	שריג ריבועי	$X_c=0.59$		
	שריג חלת דבש	$X_c=0.69$		
(3d)	קובי פשוט	$X_c=0.3116$		
	BCC	$X_c=0.246$	$\beta\sim 0.34-0.41$ בשריגים אלה	
	FCC	$X_c=0.198$		

בשני מקרים קל לחשב: במימד אחד $X_c=1$ מכיון שמספיק נקודת שריג לא מאוכלסת כדי לקטוע המעבר לשניים.

מימד אינסופי: Cayley tree   f: branching number

במקרה הזה $X_c=\frac{1}{f}$

כיצד ניתן להשתמש בתוצאות אלו כדי לחשב את X_c בבעיית הלוקליזציה שלנו?
הנקודה החשובה היא לשים לב שה-clusters האינסופיים המוגדרים ב- X_c הם בקירוב תת-מימדיים
ספקטרום האנרגיה האלקטרונים בתוכם אינו מוגבל לכן בקירוב על ידי השערת tight-binding
חד מימדית שבהעדר אי סדר הספקטרום שלו היה $2I\cos(ka)$ כלומר האנרגיות
שלו נמצאות בתחום $[-2I, 2I]$

כדי לקיים את תנאי הרזוננס עלינו לבחור לכן $\frac{\Delta}{2}=2I \Rightarrow \Delta=4I$

⇐ דה-לוקליזציה מתרחשת כאשר נוצר cluster אינסופי
בשריג קלי פשוט זה מתרחש עבור $\frac{\Delta}{W}=X_c\simeq 0.3$

ולכן עבור $\frac{4I}{W}\simeq 0.3$

$$\Rightarrow \left(\frac{I}{W}\right)_c \simeq 0.075$$

חישובים נומריים של מודל אנדרסון על שריג קלי מוצאים $\left(\frac{I}{W}\right)_c=0.066$.

בהמשך נראה לכך כבר גישה נוספת לבדיקת סף הלוקליזציה מעבר מוליך-מבודד.
גישה זו נקראת scaling. לפני כן נחזור לכמה רגעים ונחזור למודל דרודה.

במודל דרודה כל אלקטרון מהלך מהלך אקראי. נניח כי האלקטרון מתחיל בראשית (במרחב d ממדי) והולך צעד בכיוון $\vec{\Delta r}$ שהוא משתנה אקראי, המתפלג בהתאם להתפלגות $P(\vec{\Delta r})$.
לדוגמה במודל דרודה כיוון הצעד הינו אקראי ומתפלג אחיד. הסיכוי לקבל צעד באורך זה הוא הסיכוי שהאלקטרון לא עבר התנגשות במשך זמן $t=\frac{\Delta r}{v}$ והתנגשות במהלכו של עבר התנגשות בהסתברות $\frac{dt}{\tau}=\frac{d\Delta r}{v\tau}$ (אנו מניחים תנועה במהירות קבועה v)

הסיכוי לכך שהוא לא עבר התנגשות במשך זמן t .

$$\lim_{dt\to 0}\left(1-\frac{dt}{\tau}\right)^{\frac{t}{dt}}=\lim_{N=\frac{t}{dt}\to\infty}\left(1-\frac{t}{\tau}\frac{1}{N}\right)^{N}=e^{-\frac{t}{\tau}}=e^{-\frac{\Delta r}{v\tau}}$$

⇐ הסיכוי לקבל צעד באורך בין Δr ל $\Delta r+d\Delta r$ הוא $\frac{1}{v\tau}e^{-\frac{\Delta r}{v\tau}}d\Delta r$

נניח כי מיקומו של האלקטרון אחרי N צעדים = התנגשויות הוא $\vec{r}_N$ ונסמן ב $P_N(\vec{r})$ את צפיפות ההסתברות למצוא אותו ב $\vec{r}$ אחרי N צעדים. אני מחפש צפיפות ההסתברות למצוא את האלקטרון ב $\vec{r}$ כעבור N+1 צעדים [illegible]

$$P_{N+1}(\vec{r}) = \int P(\Delta\vec{r})\, P_N(\vec{r}-\Delta\vec{r})\, d^d\Delta r$$

כשהשתמשנו באי תלות של הצעדים.

כאשר $N\to\infty$ ‏$P_N(\vec{r})$ משתנה על פני סקלות אורך הגדולות בהרבה מאורך צעד אופייני Δr

ולכן ניתן לפתח אותה בטור טיילור בתוך האינטגרל נקבל

$$P_{N+1}(\vec{r}) = \int P(\Delta\vec{r}) \left[P_N(\vec{r}) - \Delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla} P_N(\vec{r}) + \frac{1}{2}\left(\Delta\vec{r}\cdot\vec{\nabla}\right)^2 P_N(\vec{r}) + \cdots \right] d^d\Delta r$$

נשתמש בכך ש $\int P(\Delta\vec{r})\cdot\Delta\vec{r}\, d^d\Delta r = 0$ $\Leftarrow$ איזוטרופיות הצעדים , $\int P(\Delta\vec{r})\, d^d\Delta r = 1$

$$= P_N(\vec{r}) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d} \left\langle (\Delta r)_i (\Delta r)_j \right\rangle \frac{\partial^2 P_N(\vec{r})}{\partial r_i\, \partial r_j}$$

בגלל איזוטרופיות והמהלך המקרי נקבל ש $\langle (\Delta r)_i (\Delta r)_j \rangle = 0$ עבור $i\neq j$ ולכן

$$= P_N(\vec{r}) + \frac{1}{2d}\langle \Delta r^2\rangle \cdot \nabla^2 P_N(\vec{r})$$

כשהשתמשנו בכך ש $\langle (\Delta r)_i^2 \rangle = \frac{1}{d}\langle \Delta r^2\rangle$

נרצה לקשור את מספר הצעדים N למשתנה זמן בעזרת הזמן הממוצע בין התנגשויות τ:

$t = N\tau$ נקבל לאחר הגדרת $\rho(t,\vec{r}) = P_N(\vec{r})$ פונקציית הצפיפות של החלקיקים

$$\rho(t+\tau,\vec{r}) - \rho(t,\vec{r}) = \frac{1}{2d}\langle \Delta r^2\rangle \nabla^2 \rho(t,\vec{r})$$

$$\frac{\rho(t+\tau,\vec{r}) - \rho(t,\vec{r})}{\tau} = \frac{1}{2d}\frac{\langle \Delta r^2\rangle}{\tau} \nabla^2 \rho(t,\vec{r})$$

ולגבול כל זוג τ קטן יחסית לסקלות הזמן שבהן באות זמן לגו.

משוואת הדיפוזיה:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D\nabla^2 \rho$$

כאשר קבוע הדיפוזיה מוגדר

$$D = \frac{1}{2d\tau}\langle \Delta r^2\rangle$$

במודל דרודה:

$$= \frac{1}{2d\tau}\int_0^\infty \frac{d\Delta r}{v\tau} e^{-\frac{\Delta r}{v\tau}} \cdot \Delta r^2 = \frac{1}{2d\tau}\cdot 2(v\tau)^2 = \frac{v^2\tau}{d}$$

הפתרון המפורש לכן דעיכה. נמצא את פונקציית הצפיפות של חלקיק שב $t=0$ נמצא בראשית:
$\rho(\vec{r}, t=0)=\delta(\vec{r})$. נבצע את התמרות הפוריה לפלס בזמן ופוריה במקום

$$\int_0^\infty dt \int d^d r\, e^{-st-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} - D\nabla^2 \rho\right] = 0$$

$$\int d^d r\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \left[s\cdot\rho(\vec{r},s) - \underbrace{\rho(\vec{r},0)}_{\delta(\vec{r})} - D\nabla^2\rho(\vec{r},s)\right] = 0$$

$$\rho(s,\vec{q}) = \frac{1}{s+Dq^2} \qquad \Leftarrow$$

$$\rho(\vec{r},t) = \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} e^{st} \rho(\vec{q},s)$$ נבצע את הטרנספורמציות ההפוכות לקבל

כאשר כל הנקודות הסינגולריות של $\rho(\vec{q},s)$ נמצאות משמאל לקו $Re\, s = c$ ולכן $c=\varepsilon$ אינפיניטסימלי

$$= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \int_{-\infty+i\varepsilon}^{\infty+i\varepsilon} \frac{dz}{2\pi i} e^{-izt} \frac{-1}{z+iDq^2} \qquad s=-iz$$

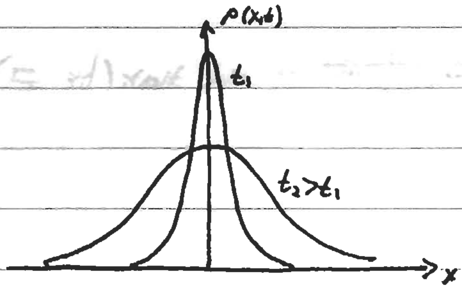
$$= \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{-Dq^2 t}\, \theta(t) \qquad \text{(contour integral)}$$

$$= \frac{1}{(4\pi D t)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}}\, \theta(t)$$ (השלמה לריבוע)

כלומר הפתרון לכן כעבור זמן t מתחילת הדיפוזיה היא גאוסיאן במקום עם

$$\langle r^2 \rangle = 2dDt$$

כלומר: מרחק מהראשית ~ $t^{1/2}$



$$\sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

נעבור למוליכות דרודה שמצאנו
ונציג אותה בצורה שונה מעט.

$$n = \frac{A_d k_F^d}{(2\pi)^d}$$

מספר המצבים ליחידת נפח בגוש פרמי ב d מימדים:

$$A_d = \begin{cases} 2 & d=1 \\ \pi & d=2 \\ \frac{4}{3}\pi & d=3 \end{cases}$$

צפיפות המצבים ליחידת אנרגיה ליחידת נפח ב E_F

$$\nu = \frac{dn}{dE_F} = \frac{dn}{dk_F}\frac{dk_F}{dE_F}$$

$$= \frac{A_d d \cdot k_F^{d-1}}{(2\pi)^d} \cdot \frac{1}{\hbar v_F}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$$

$$\frac{dE_F}{dk_F} = \hbar^2 \frac{k_F}{m} = \hbar v_F$$

$$\Leftarrow \quad \sigma = e^2 \overbrace{\nu \frac{\hbar v_F k_F}{d}}^{n} \cdot \frac{\tau}{m}$$

$$= \frac{e^2 \nu v_F^2 \tau}{d}$$

$$= e^2 \nu D$$

(Einstein relation)

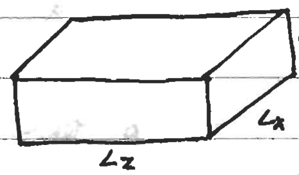
נעבור כעת מהולכה הגולמית דרך הגודל - במוליכות לגבי במוליכות הסגולית

בשלושה מימדים

$$G = \sigma \frac{L_x L_y}{L_z}$$

במימד d

$$\left(= \sigma \frac{L^{d-1}}{L} = \sigma L^{d-2} \right)$$



$$= \frac{e^2 D}{L_z^2} \left(\nu \cdot L_x L_y L_z\right)$$

כאשר המרחק הממוצע בין רמות אנרגיה (ליד E_F) : $\frac{1}{\Delta}$

Δ ← mean-level spacing

$$= \frac{e^2}{\hbar} \frac{D\hbar}{L_z^2} \cdot \frac{1}{\Delta}$$

"היחידה הקוונטית" למוליכות

$$= \frac{e^2}{\hbar}\frac{\hbar}{t_c}\cdot\frac{1}{\Delta}$$

נקרא ה Thouless time : $t_c = \frac{L_z^2}{D}$

זהו הזמן הדרוש לחלקיק לעבור בדיפוזיה מצד אחד של הדגימה לצד השני

$$= \frac{e^2}{\hbar}\frac{E_c}{\Delta}$$

$E_c = \frac{\hbar}{t_c} = \frac{\hbar D}{L_z^2}$: Thouless energy

זוהי סקלת האנרגיה של הדיפוזיה (בינוני) מצד אחד של הדגימה לצד השני.

$$g = \frac{G}{e^2/\hbar} = \frac{E_c}{\Delta}$$

קבלנו לכן את ה dimensionless conductance

נתונה על ידי יחס בין שתי סקלות אנרגיה קטנות

$$E_F, \frac{\hbar}{\tau} \gg E_c, \Delta$$

כיצד נוכל להבין באופן אינטואיטיבי קשר זה? נחשוב על שני דגמים בגודל L ונצמד ביניהם. אלמנט המטריצה המקשר בין מצבים בשני הדגמים הוא בסדר גודל E_c (מכיון שבפועל נוכל לחשוב שהחבור נעשה מנקודה בדגם אחד לנקודה אחרת בדגם שני). E_c הוא לכן הרוחב האנרגטי האופייני שכנראה רמה בכל אחד מהדגמים נתונה שינויים. אם $E_c \gg \Delta$ פונקציות הגל של המערכת המשולבת צפויות להיות קומבינציות מסודרות של פונקציות הגל של כל אחד מהדגמים המקוריים ולכן מתארות מצבים מפושטים (על שני הדגמים) אם לעומת זאת $E_c \ll \Delta$ פונקציות הגל של המערכת המשולבת מושפעות אך מעט מאוד ~~מהמצבים המקוריים~~ מפונקציות הגל של הדגמים המקוריים ולכן מתארות מצבים ממוקמים בכל אחד מהדגמים המקוריים.

נבדוק כעת כיצד g עובר scaling כאשר נגדיל את גודל הדגמים. אנו צריכים להגדיל את גודל הדגמים מ L ל bL ע"י צירוף של b תת-מערכות מגודל L.

כיצד משתנה g תחת טרנספורמציה שכזו?

קל לראות שמתקיים

$$\frac{1}{\Delta(L)} = \nu L^d \Rightarrow \frac{1}{\Delta(bL)} = \nu (bL)^d$$

$$\Leftarrow \quad \Delta(bL) = b^{-d}\Delta(L)$$

אך כיצד משתנה $E_c(L)$? ומה $E_c(bL)$?

היחס בין $E_c(L)$ ל $E_c(bL)$ יכול להיות תלוי במידע שדרוש להתאים את פונקציות הגל של כל אחת מתת המערכות בגודל L על השפה של תת מערכות אלה, כדי ליצור את פונקציית הגל של המערכת בגודל bL. מצד שני, הרגישות של פונקציית הגל לתנאי השפה היא האינפורמציה המוכלת ב $g(L)$. לכן נצפה ש $E_c(bL)$ תלוי רק ב b וב $g(L)$. במקרה כזה נגיע ל

הנחת ה "scaling":

$$\circledast \quad g(bL) = f(b, g(L))$$

Gang of four: Abrahams, Anderson, Licciardello, Ramakrishnan

שימו לב כי L אינו מופיע בפונקציית ה scaling f

נראה כי הנחה זו מתקיימת בשני גבולות:

1. בתחום האוהמי (המתכתי) $(g \gg 1)$

$$g(L) = \frac{G(L)}{e^2/\hbar} = \frac{\overset{\text{קבוע לא תלוי ב } L}{\sigma}}{e^2/\hbar} L^{d-2}$$

$$\Leftarrow \quad g(bL) = b^{d-2} g(L)$$

2. בתחום המבודד $(g<1)$ בתחום זה אנו יודעים ש $g(L)$ דועך אקספוננציאלית עם גודל

אורך הלוקליזציה ξ:

$$g(L) = g_0 e^{-\frac{L}{\xi}}$$

$$\Leftarrow \quad g(bL) = g_0 \left(\frac{g(L)}{g_0}\right)^b$$

ננסה להראות את הטענה עבור $b=2$. לשם כך נחשב את קצב המעבר $E_c = \frac{\hbar}{t_c}$ מצד אחד של הגוש לצדו השני. מה שיש לנו שתי מערכות כאלה. מהו קצב המעבר דרך כל המערכת?

מתוך ההפרעות בסדר ראשון (כלל הזהב של פרמי)

$$E_c(2L) \sim \frac{E_c^2(L)}{\Delta(L)} \quad : \quad \sum \underbrace{\delta(E_i - E_f)}_{\frac{1}{\Delta}} \underbrace{|\langle i|H|f\rangle|^2}_{E_c^2}$$

ולכן

$$g(2L) = \frac{E_c(2L)}{\Delta(2L)} = \overset{\text{קבוע}}{C}\,\frac{E_c(L)}{2^{-d}\Delta(L)}\,\frac{E_c(L)}{\Delta(L)} = C2^d g^2(L)$$

קל לבדוק שפתרון משוואה זו הינו מהצורה

$$g(L) = g_0 e^{-\frac{L}{\xi}} \qquad \left(g_0^{-1} = C\cdot 2^d\right)$$

הנחת ה scaling היא שהקשר ⊛ מתקיים בכל התחום שבין שני גבולות אלה.

מתוך ⊛ נקבל:

$$\frac{dg(bL)}{db} = \frac{df(b,g(L))}{db}$$

$$\frac{L}{b}\frac{dg(bL)}{dL} = \frac{g(bL)}{b}\frac{d\ln g(bL)}{d\ln L}$$

$$\Leftarrow \quad \frac{d\ln g}{d\ln L} = \frac{1}{g}\frac{df}{db}(b,g)\Big|_{b=1} = \beta(g)$$

פונקציה שלא תלויה ב-L. תלויה רק ב-g.

זוהי משוואת זרימה (flow equation) של g המתארת כיצד מוליכות המערכת משתנה עם שינוי גודל הדגימה.

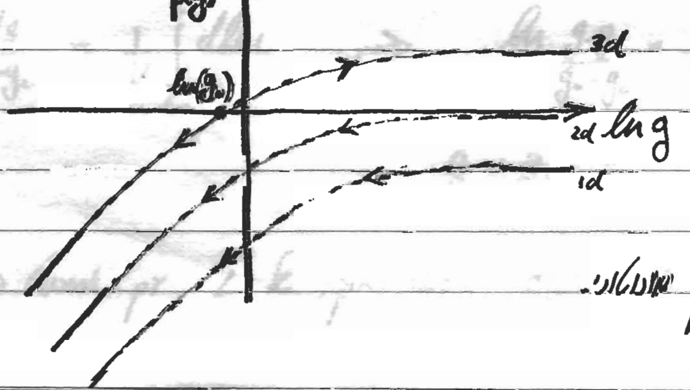
התחום המתכתי $g \gg 1$

$$g(L) \sim L^{d-2} \Rightarrow \beta(g) = d-2$$

התחום המבודד $g < 1$

$$g(L) = g_0 e^{-\frac{L}{\xi}} \Rightarrow \ln g = \ln g_0 - \frac{L}{\xi}$$

$$\beta(g) = \frac{d\ln g}{d\ln L} = -\frac{L}{\xi} = \ln\left(\frac{g}{g_0}\right)$$

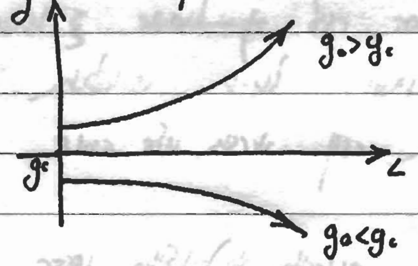


נראה כי ניתן לעבור בין הגבולות באופן מונוטוני.

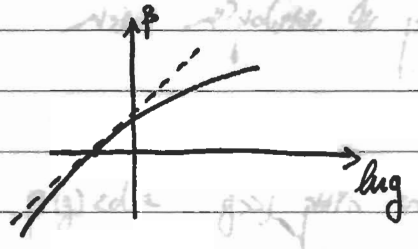
אם נסמן ב L_0 את סקלת האורך המינימלית שבה יש משמעות לדבר על מוליכות וב g_0 את המוליכות על פני סקלה זו נקבל את תנאי ההתחלה לבעיה על פני הדיאגרמה שקיבלנו.

מכיוון שב $d=1,2$ $\beta(g)<0$ לכל g, מוליכות הדוגמא תמיד צריכה לקטון יותר ויותר עם הגדלת גודל המערכת.

ב $d=3$ קיימת לבעיה נקודת שבת בלתי יציבה ב g_c כך שאם
$g_0>g_c$ $\beta(g)>0$ והמערכת צועדת למצב המתכתי בו המוליכות גדלה עם L
$g_0<g_c$ $\beta(g)<0$ והמערכת צועדת למצב המבודד.



באופן מעשי יש לנו מעבר מוליך-מבודד ב g_c



נפתח את $\beta(g)$ סביב $g=g_c$ בסדר הנמוך ביותר נקבל

$$\beta(g)=\frac{1}{\nu}\left(\frac{g-g_c}{g_c}\right)$$

שיפוע הגרף ב $g=g_c$ זהו אקספוננט קריטי, לא [illegible]!

בסביבת g_c נוכל גם לקרב $\frac{d\ln g}{d\ln L}\simeq\frac{1}{g_c}\frac{dg}{d\ln L}$ ולכן כל זה לאינטגרציה מובהקת

$$\frac{1}{g_c}\frac{dg}{d\ln L}=\frac{1}{\nu}\frac{g-g_c}{g_c}$$

$$\int_{g_0}^{g}\frac{dg}{g-g_c}=\frac{1}{\nu}\int_{L_0}^{L}d\ln L \Longrightarrow \ln\frac{g-g_c}{g_0-g_c}=\frac{1}{\nu}\ln\left(\frac{L}{L_0}\right)$$

$$\Leftarrow \quad g=g_c+(g_0-g_c)\left(\frac{L}{L_0}\right)^{1/\nu}$$

אנו רואים כי במצב זה - המצב הקריטי $g(L)$ משתנה כחזקה של L עם אקספוננט קריטי $\frac{1}{\nu}$.

אנו עוזבים את התחום הקריטי כאשר הלינאריזציה נשברת $\frac{g-g_c}{g_c} \sim 1$ וזה קורה עבור סקלת אורך ξ הנקבעת מתוך

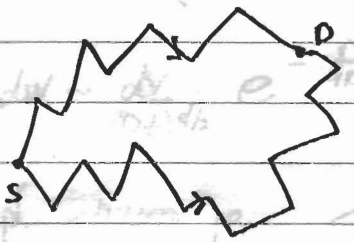
$$1 = \frac{|g_c-g|}{g_c}\left(\frac{\xi}{L_0}\right)^{1/\nu} \Rightarrow \xi = L_0\left(\frac{|g_c-g|}{g_c}\right)^{-\nu}$$

סקלת אורך זו היא חשובה מכיוון שבה המערכת עוברת מהתנהגות קריטית להתנהגות מתכתית (עבור $g>g_c$) או להתנהגות מבודדת וממוקמת (עבור $g<g_c$), לכן כאן המשמעות ξ הינו אורך הלוקליזציה.

הערות: 1. מכאן המודל מנבא שמתכת נראה כי מעבר פאזה רגיל, אך ~~ממשה~~ ξ מתבדר במעבר. אך למעשה הוא אינו מעבר פאזה תרמודינמי. למרות שהמוליכות משתנה באופן חד במעבר כל הגדלים התרמודינמיים כגון אנרגיה חופשית וכו', דבבסיס הם חלקים לגמרי דרך המעבר.

2. מסקנה זו הינה עבור אלקטרונים חסרי אינטראקציה. כשנכניס אינטראקציה מעבר מוליך-מבודד יכול להיות מעבר תרמודינמי אמיתי. מכן אף שאינטראקציה משנה מעבר ~~פאזה~~ מוליך מבודד גם ב $d=2$.

נשים כעת לב שבתורת הסקיילינג שלנו כך היוצא כי גם בתחום המתכתי הזמני וכו' $\beta(g)<d-2$. הנחה זו הייתה תשובה במודל כדי לקבל שב $d=2$ המערכת תמיד מבודדת. משמעות הטענה היא שגם בתחום זה קיימים תהליכים הנוטים להקטין את המוליכות ביחס לצפיה הקלאסית. לשם כך נבחן תהליך ההתפזרות של אלקטרון מנקודה S לנקודה D



ההנחה שהתווך הבינוני הוא אלסטי - הזמן בו האלקטרון מצוי נתון לפי הפאזה של פונקציית הגל שלו אינו משתנה τ - הזמן הממוצע בין התנגשויות. עלינו לחבר את כל האמפליטודות הקוונטיות למעבר מ S ל D דרך כל המסלולים האפשריים: A_i

$$W_{S\to D} = \Big|\sum_{i\,\text{paths}} A_i\Big|^2 = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i\neq j} A_i A_j^*$$ ההסתברות למעבר תהא לכן