Research Paper

Phase Transition Analysis in the Combined PRBM-RD Model Using Quantum Indicators [1]

Mohammad Pouranvari[2*]

Received: 2024.11.04
Revised: 2025.02.09
Accepted: 2025.03.01

1. Introduction

In condensed matter physics, understanding the effects of disorder and randomness on quantum systems is crucial for exploring phenomena such as localization and phase transitions. This study investigates the localization and transport properties of a two-dimensional system using a hybrid model that combines the Power-Law Random Banded Matrix (PRBM) model and the Random Dimer (RD) model. The primary objective is to analyze phase transitions and the influence of system parameters, on quantum states. The innovation of this work lies in the combination of these two models, which allows for the simultaneous study of short-range and long-range disorder effects, providing new insights into the interplay between localization and extended states in complex quantum systems.

2. Methodology

The research employs numerical simulations based on exact diagonalization of the Hamiltonian matrix for the combined PRBM-RD model. The Hamiltonian incorporates local disorder through the RD model, where site energies are randomly assigned values of 0 or ϕ_b, and long-range couplings through the PRBM model, where off-diagonal elements follow a power-law decay with exponent α. Systems of size N=1000 are studied, and results are averaged over 1000 independent disorder realizations to ensure statistical accuracy. Key quantities such as the participation ratio (PR) and the energy level spacing ratio (RN) are computed to characterize the localization and spectral properties of the system. The PR measures the extent of wavefunction delocalization, while RN distinguishes between extended (Gaussian unitary ensemble) and localized (Poisson) phases based on the distribution of energy level spacings.

---

[1] https://doi.org/10.22051/ ijap.2025.48588.1433
[2] Assistant Professor, Department of Solid-State Physics, Faculty of Science, University of Mazandaran, Babolsar, Iran. Email: m.pouranvari@umz.ac.ir

3. Results and Discussion

The results demonstrate that the system undergoes a phase transition from extended to localized states as the parameters α and ϕ_b are varied. Increasing α weakens long-range couplings, leading to enhanced localization, as evidenced by decreased PR and a shift in RN from 0.53 (extended phase) to 0.38 (localized phase). Similarly, increasing W intensifies local disorder, further promoting localization. However, the effect of W is less pronounced compared to α, highlighting the dominant role of long-range couplings in determining the phase transition. These findings align with previous studies on the individual PRBM and RD models but reveal new insights into the combined effects of short-range and long-range disorders. The hybrid model successfully captures the complex interplay between these disorder types, offering a more comprehensive framework for studying quantum phase transitions in disordered systems.

Discuss the implications of your findings and their significance in the context of your field. Address how your research contributes to existing knowledge.

4. Conclusion

This study provides a detailed analysis of phase transitions in the combined PRBM-RD model, demonstrating the critical roles of α and ϕ_b in controlling the transition from extended to localized states. The results contribute to a deeper understanding of localization phenomena in disordered quantum systems and highlight the potential of hybrid models for exploring complex behaviors. Future research could extend this work by incorporating additional symmetries, studying higher-dimensional systems, or applying the model to other disordered materials such as topological insulators and amorphous solids. This research lays the groundwork for further investigations into the effects of disorder and randomness in quantum systems, with potential applications in materials science and nanotechnology.

Keywords: *Quantum Phase Transition, Participation Ratio, Energy Level Spacing Ratio, Localized and Extended Systems, Disorder and Randomness.*

References

[1] Vojta, T., "Disorder in quantum many-body systems", Annual Review of Condensed Matter Physics 10(1), 233-252, 2019. DOI: https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013433

[2] Price, D.L., Saboungi, M.L. and Bermejo, F.J., "Dynamical aspects of disorder in condensed matter", Reports on Progress in Physics 66(4), 407, 2003. DOI: https://doi.org/10.1088/0034-4885/66/4/201

[3] Siegrist, T., Jost, P., Volker, H., Woda, M., Merkelbach, P., Schlockermann, C. and Wuttig, M., "Disorder-induced localization in crystalline phase-change materials", Nature materials 10(3), 202-208, 2011. DOI: https://doi.org/10.1038/nmat2934

[4] Wang, J.J., Xu, Y.Z., Mazzarello, R., Wuttig, M. and Zhang, W., "A review on disorder-driven metal–insulator transition in crystalline vacancy-rich GeSbTe phase-change materials", Materials 10(8), 862, 2017. DOI: https://doi.org/10.3390/ma10080862
[5] Punnoose, A. and Finkel'stein, A.M., "Metal-insulator transition in disordered two-dimensional electron systems", Science 310(5746), 289-291, 2005. DOI: https://doi.org/10.1126/science.1115660
[6] Dunlap, D.H., Wu, H.L. and Phillips, P.W., "Absence of localization in a random-dimer model", Physical Review Letters 65(1), 88, 1990. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.88
[7] Datta, P.K., Giri, D. and Kundu, K., "Nonscattered states in a random-dimer model", Physical Review B 47(16), 10727, 1993. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.10727
[8] Bovier, A., "Perturbation theory for the random dimer model", Journal of Physics A: Mathematical and General 25(5), 1021, 1992. DOI: https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/25/5/011
[9] Mirlin, A.D., Fyodorov, Y.V., Dittes, F.M., Quezada, J. and Seligman, T.H., "Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices", Physical Review E 54(4), 3221, 1996. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.54.3221
[10] Varga, I. and Braun, D., "Critical statistics in a power-law random-banded matrix ensemble", Physical Review B 61(18), R11859, 2000. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.R11859
[11] Bogomolny, E. and Sieber, M., "Power-law random banded matrices and ultrametric matrices: Eigenvector distribution in the intermediate regime", Physical Review E 98(4), 042116, 2018. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.042116
[12] Calixto, M. and Romera, E., "Inverse participation ratio and localization in topological insulator phase transitions", Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment 2015(6), P06029, 2015. DOI: https://doi.org/10.1088/1742-5468/2015/06/P06029
[13] Roy, S., Mishra, T., Tanatar, B. and Basu, S., "Reentrant localization transition in a quasiperiodic chain", Physical Review Letters 126(10), 106803, 2021. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.106803
[14] Evers, F. and Mirlin, A.D., "Fluctuations of the inverse participation ratio at the Anderson transition", Physical review letters 84(16), 3690, 2000. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.3690
[15] Atas, Y.Y., Bogomolny, E., Giraud, O., Vivo, P. and Vivo, E., "Joint probability densities of level spacing ratios in random matrices", Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical 46(35), 355204, 2013. DOI: https://doi.org/10.1088/1751-8113/46/35/355204
[16] Pal, A. and Huse, D.A., "Many-body localization phase transition", Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics 82(17), 174411, 2010. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.174411

مقالهٔ پژوهشی

بررسی گذار فاز موضعی- انتقالی در الگوی ترکیبی PRBM- RD با استفاده از شاخص‌های کوانتومی[1]

محمد پورانوری[2]

فصلنامهٔ علمی فیزیک کاربردی ایران
دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه الزهرا
سال پانزدهم، پیاپی ۴۰، بهار ۱۴۰۴
صص ۵۱ - ۶۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۸/۱۴
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۱۱/۲۱
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۲/۱۱

چکیده:

در این پژوهش، به مطالعه رفتارهای موضعی و انتقالی یک سامانه یک بعدی با استفاده از یک الگوی ترکیبی که شامل الگوی ماتریس‌های تصادفی پراکنده (PRBM) و الگوی جایگزینی تصادفی (RD) است، پرداخته شده است. هدف اصلی این پژوهش، بررسی گذارهای فاز و تاثیر کمیت‌های سامانه بر حالت‌های کوانتومی آن است. برای تحلیل دقیق این گذارها، از کمیت‌های متنوعی همچون نسبت مشارکت و نسبت فواصل انرژی استفاده شده که هر یک می‌تواند داده‌های ارزشمند درباره پویایی سامانه ارائه دهد. نتایج نشان دهنده آن است که با تغییر مقادیر کمیت‌های α و ϕ_b، می‌توان به صورت موثری گذار از حالت گسترده به حالت موضعی را کنترل نمود. به صورت خاص، مقدار α به عنوان عامل مشخص کننده در این گذارها عمل کرده و نقش کلیدی در ایجاد تغییرات فاز ایفا می‌کند. این الگوی ترکیبی با توانایی شبیه‌سازی دقیق، امکان بررسی جامع رفتارهای کوانتومی در سامانه‌های پیچیده را فراهم کرده و راهگشای مطالعات آتی در زمینه تاثیر اختلال و تغییرات تصادفی در گذارهای فاز کوانتومی است. این پژوهش می‌تواند بستر مناسبی برای درک عمیق‌تر روش‌های گذار فاز در سامانه‌های بی نظم ایجاد کند.

واژگان کلیدی: *گذار فاز کوانتومی، الگوی ترکیبی PRBM-RD، نسبت مشارکت، نسبت فواصل انرژی، سامانه‌های جایگزیده و گسترده، اختلال، تصادفی‌بودن.*

---

[1] https://doi.org/10.22051/ijap. 2025.48588.1433

[2] استادیار، گروه فیزیک حالت جامد، دانشکده علوم، دانشگاه مازندران، بابلسر، ایران. Email: m.pouranvari@umz.ac.ir

۱. مقدمه

در فیزیک ماده چگال، الگوهای تصادفی و ناهمسانگردی نقش اساسی در درک رفتار سامانه‌های بس‌ذره‌ای ایفا می‌کنند. این الگوها به‌ویژه برای بررسی ویژگی‌های الکترونی سامانه‌هایی که تحت تأثیر ناهمگنی‌ها و بی‌نظمی‌ها قرار دارند، اهمیت دارند. سامانه‌های ناهمسانگرد می‌توانند شامل اثراتی از قبیل جایگزینی تصادفی اتم‌ها، بی‌نظمی در چیدمان و جابجایی‌های تصادفی باشند. مطالعه این الگوها به ما امکان می‌دهد تا اثرات بی‌نظمی و تصادف در سامانه‌های حقیقی را بهتر درک کرده و راه‌هایی برای کنترل یا بهره‌گیری از این اثرات بیابیم [۱- ۳].

این الگوها از جمله ابزارهای قدرتمندی هستند که به فیزیکدانان اجازه می‌دهند تا ویژگی‌های انتقالی و موضعی را بررسی کنند. به صورت ویژه، با تغییر کمیت‌های سامانه‌های ناهمسانگرد، می‌توان گذارهای فاز مختلف را مشاهده کرد که از جمله مهم‌ترین آن‌ها گذار از حالت‌های موضعی به حالت‌های رسانایی است. چنین گذارهایی در سامانه‌هایی چون نیمه‌رساناها، عایق‌های توپولوژیک، و مواد پیچیده نانوساختار اهمیت فراوانی دارند [۴ و ۵].

از این‌رو، الگوهای ناهمسانگرد و تصادفی ابزارهایی ضروری برای مطالعه سامانه‌هایی هستند که در آن‌ها بی‌نظمی و تصادف نقش مهمی ایفا می‌کنند. این الگوها به ما کمک می‌کنند تا ویژگی‌های دینامیکی و استاتیکی سامانه‌های پیچیده را بهتر درک کرده و روابط بین بی‌نظمی، توابع موج و ویژگی‌های موضعی و رسانایی را کشف کنیم.

در بررسی اثرات بی‌نظمی و ناهمسانگردی در سامانه‌های فیزیکی، ترکیب الگوهای مختلف به پژوهشگران این امکان را می‌دهد که به رفتارهای پیچیده‌تری دست یابند. در این مطالعه، ترکیب دو الگوی Random Dimer (RD) و Power-Law Random Banded Matrix (PRBM) به منظور بررسی تأثیرات مشترک بی‌نظمی و ساختارهای بلندبرد و همبسته، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

الگوی RD، یک الگوی تصادفی است که در آن بی‌نظمی با جفت‌های انرژی‌های درونی تصادفی توزیع می‌شود. این ساختار سبب می‌شود تا الکترون‌ها در نواحی ویژه‌ای از سامانه به صورت جفتی رفتار کنند که این امر به حفظ همبستگی در بازه‌های کوتاه‌مدت کمک می‌کند. به عبارت دیگر، الگوی RD با القای بی‌نظمی منظم در ساختار سامانه، الگوهای موضعی و پراکندگی متفاوتی را ایجاد می‌کند که برای بررسی رفتارهای انتقال و موضعی بسیار مفید است [۶- ۸].

از سوی دیگر، الگوی PRBM، که به‌واسطه نوارهای تصادفی با توزیع‌های قانون توانی شناخته می‌شود، رفتارهای طولانی‌بردی را در سامانه القا می‌کند. این الگو به الکترون‌ها این امکان را می‌دهد

که با احتمال کاهشی نسبت به فاصله، به مکان‌های[1] دورتر جفت شوند. بنابراین، الگوی PRBM قادر است اثرات همبستگی در مقیاس‌های بزرگتر را بیان کند و می‌تواند گذار از رفتار موضعی به رفتار گسترده را نشان دهد. این ویژگی‌ها الگوی PRBM را به ابزاری موثر برای مطالعه سامانه‌هایی با بی‌نظمی و همبستگی بلندبرد تبدیل کرده است [۹- ۱۱].

هدف این پژوهش، ترکیب این دو الگو است تا سامانه‌های یک بعدی با ویژگی‌های بی‌نظمی و همبستگی متفاوت شبیه‌سازی شود. با بهره‌گیری از این الگوی ترکیبی، می‌توان ساختارهای موضعی تابع موج و اثرات ناهمسانگردی را در سامانه‌های کوانتومی پیچیده بررسی کرد. تغییر کمیت‌های موجود در هر دو الگوی به ما این امکان را می‌دهد که محدوده وسیع‌تری از حالت‌های موضعی و غیرموضعی را شبیه‌سازی کرده و درک عمیق‌تری از رفتارهای گذار فازی و ساختارهای همبستگی در این سامانه‌ها بدست آوریم.

در این پژوهش، برای بررسی اثرات بی‌نظمی و همبستگی در این الگوی ترکیبی، از رویکردهای محاسباتی و تجزیه و بررسی پیشرفته استفاده می‌شود. ابتدا، این الگوی ترکیبی به صورت دقیق تعریف می‌شود. در این مرحله، ساختارهای ماتریس هامیلتونی به همراه کمیت‌های تصادفی و توزیع‌های قانون توانی مشخص می‌شوند. برای الگوی RD، جفت‌های تصادفی از انرژی‌های درونی تولید می‌شوند، در حالی که برای الگوی PRBM، ماتریس باند شده با توزیع‌های قانون توانی تعریف می‌شود. بدین ترتیب، سامانه ترکیبی از این دو الگو ایجاد می‌شود.

پس از تعریف الگو، برای شبیه‌سازی رفتارهای الکترونیک در سامانه‌های ترکیبی، از شبیه‌سازی‌های عددی استفاده می‌شود. با به‌کارگیری قطری‌سازی دقیق، هامیلتونی‌های ایجاد شده در مرحله قبل بررسی می‌شوند. این شبیه‌سازی‌ها شامل نمونه‌برداری از حالات مختلف سامانه به‌منظور مشخص کردن ویژگی‌های فیزیکی مورد نظرمتوسط می‌باشد. پس از شبیه‌سازی سامانه، ویژگی‌های فیزیکی مختلف محاسبه می‌شود. این ویژگی‌ها شامل نسبت شرکت (PR) که می‌تواند نشان‌دهنده میزان محلی‌سازی تابع موج باشد، عدد نسبت فواصل انرژی (RN) که به بررسی فواصل انرژی سامانه اشاره دارد هستند.

در ادامه، داده‌های بدست آمده از شبیه‌سازی‌ها و محاسبات به منظور استخراج داده‌های مفید، مورد بررسی قرار می‌گیرند. این بررسی شامل محاسبه میانگین‌ها، انحرافات استاندارد، و بررسی روندهای موجود در داده‌ها می‌باشد. در نهایت، نتایج بدست آمده از این الگوی ترکیبی با داده‌های تجربی یا

[1] Site

نتایج قبلی در ادبیات علمی مقایسه می‌شود. این مقایسه می‌تواند به تأیید اعتبار الگو و همچنین بررسی نقاط قوت و ضعف آن کمک کرده و بینش جدیدی درباره اثرات بی‌نظمی و همبستگی در سامانه‌های کوانتومی بدست آورد.

انگیزه استفاده از الگوهای PRBM و RD در این پژوهش از توانایی‌های منحصر به فرد آن‌ها در بررسی رفتارهای موضعی و گسترده در سامانه‌های بی‌نظم ناشی می‌شود. الگوی PRBM، برای توصیف سامانه‌هایی با بی‌نظمی و همبستگی بلندبرد مناسب است. این الگو از یک ماتریس تصادفی با عناصری که با فاصله از قطر اصلی به صورت توان- قانونی کاهش می‌یابند، تشکیل شده است و به این‌ترتیب می‌توان بی‌نظمی و اثرات همبستگی بلندبرد را به صورت مستقیم در الگو وارد کرد. با تنظیم کمیت‌های قدرت در این الگو، می‌توان به سادگی تغییرات را در شدت و دامنه بی‌نظمی اعمال کرد و اثرات آن را بر روی حالت‌های کوانتومی بررسی کرد. این ویژگی امکان مطالعه سامانه‌هایی با رفتارهای پیچیده و تغییرات تدریجی در ویژگی‌های موضعی را فراهم می‌کند. از سوی دیگر، الگوی RD نیز برای مطالعه حالت‌های موضعی- انتقالی بسیار مناسب است. این الگوی بر مبنای جایگزینی تصادفی پایه‌گذاری شده و به این ترتیب، به ما اجازه می‌دهد که ویژگی‌های یک سامانه ناهمگن را با انتخاب تصادفی اجزای مختلف آن شبیه‌سازی کنیم. در این الگو، می‌توان اثرات بی‌نظمی محلی را بررسی کرد و به تغییرات در رفتارهای کوانتومی، ناشی از جایگزینی تصادفی واحدهای تشکیل‌دهنده سامانه، پی‌برد. افزون بر این، الگوی RD می‌تواند به صورت طبیعی برای شبیه‌سازی سامانه‌هایی با جایگزینی تصادفی اتم‌ها یا مولکول‌ها و بررسی اثرات آن بر ویژگی‌های الکترونی و کوانتومی سامانه مورد استفاده قرار گیرد.

ترکیب این دو الگو در پژوهش حاضر، به ما این امکان را می‌دهد که از توانایی‌های هر یک از آن‌ها برای شبیه‌سازی رفتارهای مختلف موضعی و انتقالی در سامانه‌های کوانتومی استفاده کنیم. با تنظیم کمیت‌های تصادفی و در نظر گرفتن دو نوع بی‌نظمی کوتاه‌برد و بلندبرد، می‌توان به سادگی حالت‌های مختلف ماده را شبیه‌سازی و اثرات کمیت‌های مختلف را بر روی رفتارهای سامانه مطالعه کرد. این الگوها در مجموع ابزاری قدرتمند را برای تحلیل ویژگی‌های پیچیده سامانه‌های بی‌نظم فراهم می‌کنند و به ما کمک می‌کنند تا درک عمیق‌تری از گذارهای موضعی-گسترده در مواد کوانتومی بیابیم.

ترکیب دو الگوی RD و PRBM در این مطالعه به دلیل توانایی آن‌ها در توصیف همزمان بی‌نظمی‌های محلی و بلندبرد انتخاب شده است. الگوی RD با ایجاد بی‌نظمی ساختاری در ساختار

سامانه، امکان بررسی اثرات موضعی‌سازی ناشی از جایگزینی تصادفی اتم‌ها یا مولکول‌ها را فراهم می‌کند. از سوی دیگر، الگوی PRBM با جفت‌شدگی بلندبرد و توزیع توانی، رفتارهای همبسته در مقیاس‌های بزرگتر را توصیف می‌کند. ترکیب این دو الگوی به ما این امکان را می‌دهد تا سامانه‌هایی با بی‌نظمی‌های پیچیده و چندمقیاسی را شبیه‌سازی کنیم که در سامانه‌های حقیقی مانند نیمه‌رساناها و مواد نانوساختار مشاهده می‌شود. همچنین باید افزود که الگوهای RD و PRBM به صورت کلی تقارن‌های ویژه‌ای را در نظر نمی‌گیرند، چرا که تمرکز اصلی آن‌ها بر روی بی‌نظمی و همبستگی‌های تصادفی است. با این حال، این الگوها توانایی گسترش برای در نظر گرفتن تقارن‌های ویژه‌ای را دارند، که می‌تواند در مطالعات آینده مورد بررسی قرار گیرد.

الگوی RD به صورت ویژه‌ای برای بررسی اثرات بی‌نظمی‌های محلی و جایگزینی تصادفی در سامانه‌های کوانتومی طراحی شده است. این الگو با ایجاد جفت‌های انرژی تصادفی در ساختار سامانه، امکان مطالعه موضعی‌سازی الکترون‌ها در نواحی ویژه‌ای از سامانه را فراهم می‌کند. این ویژگی سبب می‌شود که الگوی RD ابزاری مناسب برای تحلیل رفتارهای انتقالی و موضعی در سامانه‌هایی با بی‌نظمی‌های کوتاه‌برد باشد. از سوی دیگر، الگوی PRBM با استفاده از جفت‌شدگی بلندبرد و توزیع توانی، رفتارهای همبسته در مقیاس‌های بزرگتر را توصیف می‌کند. این الگوی به صورت ویژه‌ای برای بررسی سامانه‌هایی با بی‌نظمی‌های بلندبرد و اثرات همبستگی در فواصل دور طراحی شده است. با تنظیم کمیت α در الگوی PRBM، می‌توان شدت و دامنه این همبستگی‌ها را کنترل کرد و تأثیر آن‌ها بر گذار فاز از حالت گسترده به موضعی را مطالعه نمود. ترکیب این دو الگو به ما امکان می‌دهد تا سامانه‌هایی با بی‌نظمی‌های پیچیده و چندمقیاسی را شبیه‌سازی کنیم. این ترکیب نه تنها اثرات بی‌نظمی‌های محلی و بلندبرد را به‌طور همزمان در نظر می‌گیرد، بلکه امکان بررسی تعامل بین این دو نوع بی‌نظمی را نیز فراهم می‌کند. این ویژگی‌ها این الگوی ترکیبی را به ابزاری قدرتمند برای مطالعه سامانه‌های کوانتومی پیچیده تبدیل کرده است.

۲. الگو

در این مطالعه، الگوی ترکیبی RD+PRBM را با استفاده از هامیلتونی ویژه‌ای معرفی و بررسی می‌کنیم که توانایی توصیف سامانه‌هایی با بی‌نظمی‌های محلی و بلندبرد را داراست. هامیلتونی الگو به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = \sum_{\{i\}} \epsilon_i \, c_i^\dagger c_i + \sum_{i \neq j} t_{ij} \, c_i^\dagger c_i \qquad (۱)$$

در این هامیلتونی، ϵ_i نشان‌دهنده انرژی مکان i است و بی‌نظمی محلی را به سامانه معرفی می‌کند. در الگوی RD، این انرژی‌های مکان به صورت تصادفی دو مقدار متفاوت می‌پذیرند که در این مقاله آن دو مقدار ۰ و ϕ_b در نظر گرفته می‌شود. این دو مقدار به عنوان جایگزینی تصادفی دوتایی در ساختار سامانه عمل کرده و امکان موضعی‌سازی الکترون‌ها را فراهم می‌آورند. این جایگزینی تصادفی سبب می‌شود که رفتار کوانتومی در برخی نقاط سامانه، به شدت تحت تأثیر قرار گیرد و حالت‌های موضعی شکل بگیرند.

کمیت t_{ij} نشان‌دهنده شدت کوپلینگ بین مکان‌های i و j است و به صورت تابعی از فاصله بین مکان‌ها تعریف می‌شود. در الگوی PRBM، کوپلینگ بین مکان‌های مختلف به صورت تصادفی انتخاب می‌شود و با فاصله بین مکان‌ها طبق رابطه عکس توانی با توان α کاهش می‌یابد، که در آن α یک کمیت تنظیمی است و می‌تواند مقادیر مختلفی بپذیرد. این رابطه نشان‌دهنده‌ی بی‌نظمی بلندبرد در سامانه است و می‌توان با تغییر مقدار α خواص بلندبرد هامیلتونی را تنظیم کرد. هنگامی که α کوچک است، بی‌نظمی تأثیر بیشتری بر رفتار کلی سامانه می‌گذارد و کوپلینگ بین مکان‌ها قوی‌تر می‌شود، در حالی که با افزایش α به تدریج این اثرات کاهش می‌یابد.

از این‌رو، این هامیلتونی با دو بخش بی‌نظمی محلی ϵ_i و بی‌نظمی بلندبرد t ترکیبی از الگوهای RD و PRBM را ارائه می‌دهد و توانایی مطالعه و تحلیل گذار موضعی- انتقالی را به ما می‌دهد. این ترکیب به ما اجازه می‌دهد که به صورت روشمند رفتارهای مختلف کوانتومی را در حضور بی‌نظمی‌های متفاوت مورد بررسی قرار داده و اثرات کمیت‌های مختلفی چون α و ساختار جایگزینی تصادفی ϵ_i را بر ویژگی‌های موضعی و انتقالی سامانه مطالعه کنیم.

۳. روش شبیه‌سازی عددی

برای بررسی رفتار سامانه ترکیبی این الگو، از شبیه‌سازی‌های عددی مبتنی بر قطری‌سازی دقیق ماتریس هامیلتونی استفاده شده است. در این روش، ابتدا ماتریس هامیلتونی سیستم با ابعاد N در N ساخته می‌شود که N اندازه سامانه است. عناصر قطری متناظر با انرژی‌های روی مکان‌ها بر اساس الگوی RD به صورت تصادفی از دو مقدار گسسته صفر و ϕ_b انتخاب می‌شوند. در مقابل، عناصر غیرقطری (مقدار پرش‌ها) متناظر با جفت‌شدگی بلندبرد، با استفاده از توزیع گاوسی با واریانس وابسته به فاصله بین هر دو مکان و کمیت α تولید می‌شوند. برای اطمینان از همگرایی نتایج، برای هر مجموعه کمیت، میانگین‌گیری بر روی ۱۰۰۰ نمونه جدا از بی‌نظمی انجام شده است. قطری‌سازی

ماتریس‌ها با استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌شده کتابخانه LAPACK انجام شده و مقادیر ویژه و توابع ویژه استخراج گردیده‌اند. بررسی نتایج بر روی حالت‌های مرکزی انرژی متمرکز شده است.

۴. کمیت‌ها

در این مقاله، چند کمیت فیزیکی به عنوان ابزارهای اصلی برای تحلیل گذار فاز میان حالت‌های موضعی و گسترده بررسی شده‌اند. این کمیت‌ها شامل نسبت مشارکت، نسبت فواصل انرژی و توزیع فواصل انرژی می‌شوند. هر یک از این کمیت‌ها داده‌های منحصربه‌فرد درباره رفتار موج و ساختار طیفی سامانه ارائه می‌دهند. در ادامه، به صورت خلاصه هر یک از این کمیت‌ها و اهمیت آن‌ها در این مقاله توضیح داده می‌شوند.

نسبت مشارکت، به عنوان یک ابزار سنجش برای میزان پخش‌شدگی یک حالت موج در سامانه کوانتومی استفاده می‌شود. این کمیت به ما امکان می‌دهد تا بفهمیم یک حالت موج چقدر در تمام سامانه گسترش یافته یا در نقاط مشخصی موضعی شده است. نسبت مشارکت به صورت مستقیم از توابع ویژه هامیلتونی محاسبه می‌شود و به این صورت تعریف می‌شود که اگر حالتی در کل سامانه گسترده باشد، این کمیت مقدار بزرگی (به صورت مقیاسی نسبت به اندازه سامانه) خواهد داشت. در طرف مقابل، اگر حالت به چند مکان محدود شود، نسبت مشارکت به صورت قابل توجهی کاهش می‌یابد. این ویژگی سبب می‌شود که نسبت مشارکت ابزاری مناسب برای شناسایی رفتارهای موضعی-گسترده در سامانه‌های نامرتب باشد [۱۲- ۱۴].

نسبت فواصل انرژی، از نسبت فواصل انرژی به‌عنوان شاخصی برای شناسایی ساختار طیفی سامانه استفاده می‌شود، که ابزاری است برای تمایز بین رفتار طیفی فازهای موضعی و گسترده. کمیت RN با اندازه‌گیری نسبت بین فواصل سطوح انرژی مجاور محاسبه می‌شود و به‌صورت زیر تعریف شده است $RN = \frac{min\ (s_n, s_{n+1})}{max\ (s_n, s_{n+1})}$ که در آن $s_n = E_n - E_{n+1}$ اختلاف بین انرژی‌های مجاور است. پس از محاسبه این نسبت برای همه مکان‌ها و گرفتن میانگین آن‌ها، کمیت RN را بدست می‌آوریم.

در فاز گسترده، مقدار RN به حدود ۰.۵۳ نزدیک می‌شود اما در فاز موضعی، RN به مقدار ۰.۳۸۶ میل می‌کند که نشان‌دهنده توزیع پواسونی در فواصل انرژی‌ها است. در نزدیکی نقطه گذار فاز، RN بین این دو مقدار تغییر می‌کند و داده‌های ارزشمند در مورد گذار سامانه از یک فاز به فاز دیگر ارائه می‌دهد [۱۵ و ۱۶].

این کمیت‌ها، ابزارهای قابل توجهی برای تحلیل ویژگی‌های موضعی- انتقالی سامانه‌های کوانتومی در حضور بی‌نظمی هستند و در این مقاله به صورت ویژه به کار گرفته شده‌اند تا اثرات مختلف کمیت‌های تنظیمی در الگوی RD+PRBM بررسی شوند. در بخش نتایج، نتایج مربوط به کمیت‌های مورد بررسی را در ارتباط با کمیت‌های گوناگون گزارش می‌کنیم.

۵. نسبت مشارکت بر حسب α

نمودار نسبت مشارکت بر حسب α نشان می‌دهد که با افزایش α ، میزان گسترش حالت‌های موجی به تدریج کاهش می‌یابد. این کاهش نمایانگر افزایش موضعیت سامانه است، به صورتی که هرچه مقدار α افزایش می‌یابد، سهم مشارکت کاهش یافته و سامانه به فاز موضعی نزدیک‌تر می‌شود. از نمودار مربوطه، نقطه گذار فاز در حدود $\alpha = 1$ مشاهده می‌شود؛ در این نقطه، سامانه از حالت گسترده به حالت موضعی تغییر می‌کند. همچنین، برای مقادیر مختلف (ϕ_b)، روند کلی حفظ شده است، به صورتی که هرچه (ϕ_b) بیشتر باشد، نسبت مشارکت کاهش می‌یابد. هرچند، این تغییرات به صورت نسبی کم بوده و تأثیرات کمی بر روی سهم مشارکت دارند. نمودار این نتایج در شکل (۱) قابل مشاهده است.

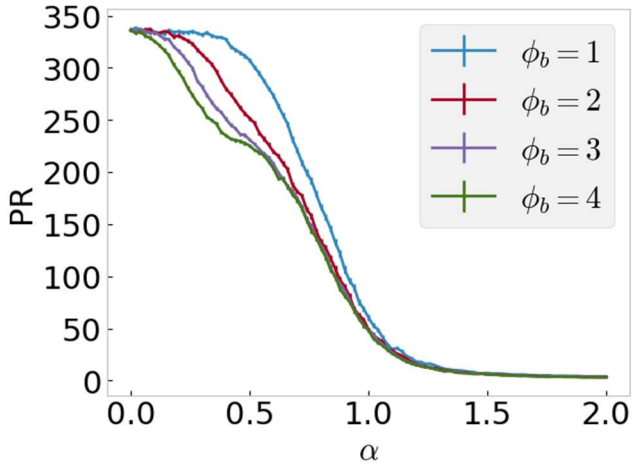

Fig. 1 Plot of the PR as α changes. In this calculation, system size is 1000, and we made statistical average over 1000 samples.

شکل ۱ نمودار رفتار سهم مشارکت بر حسب تغییرات α. در این محاسبات اندازه‌ی سامانه برابر با ۱۰۰۰ در نظر گرفته شده و بر روی تعداد ۱۰۰۰ نمونه آماری متوسط گرفته شده است.

۶. نسبت مشارکت بر حسب (ϕ_b)

نمودار نسبت مشارکت به عنوان تابعی از (ϕ_b) نشان می‌دهد که با افزایش (ϕ_b)، سهم مشارکت کاهش می‌یابد و سامانه به سمت فاز موضعی حرکت می‌کند. هرچند، گذار فاز در این مورد به وضوح حالت قبلی که نسبت مشارکت بر حسب α بود، قابل مشاهده نیست. در عین حال، مشاهده می‌شود که برای مقادیر بالاترα، نسبت مشارکت کمتر می‌شود که با نتایج بدست‌آمده از نمودار قبلی همخوانی دارد. این نمودار در شکل (۲) ارائه شده است.

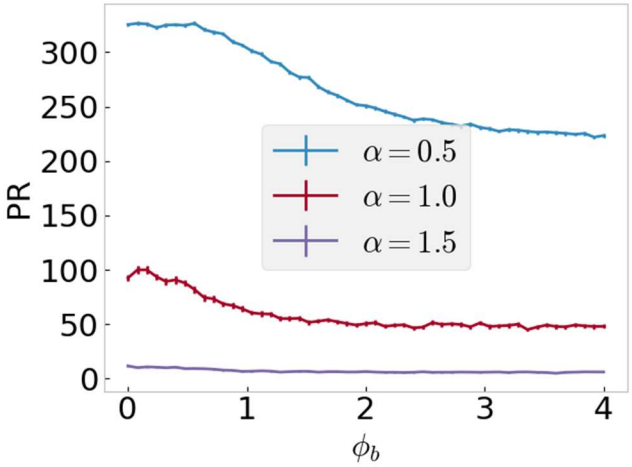

Fig. 1 Plot of the PR as ϕ_b changes. In this calculation, system size is 1000, and we made statistical average over 1000 samples

شکل ۲ نمودار رفتار سهم مشارکت بر حسب تغییرات ϕ_b. در این محاسبات اندازه‌ی سامانه برابر با ۱۰۰۰ در نظر گرفته شده و بر روی تعداد ۱۰۰۰ نمونه آماری متوسط گرفته شده است.

.

۷. RN حسب α

با تحلیل RN بر حسب α، مشاهده می‌شود که در مقادیر کمتر از $\alpha = 1$، RN به مقدار حدودی ۰.۵۵ نزدیک است که با رفتار پیش‌بینی‌شده برای فاز گسترده همخوانی دارد. برای مقادیر بالاتر از $\alpha = 1$، RN به حدود ۰.۳۸ نزدیک می‌شود که نشان‌دهنده تغییر فاز به سمت فاز موضعی است. این رفتار به خوبی گذار فاز از حالت گسترده به حالت موضعی را نشان می‌دهد و با نتایج نسبت مشارکت نیز همخوانی دارد. نمودار مربوطه در شکل (۳) ارائه شده است.

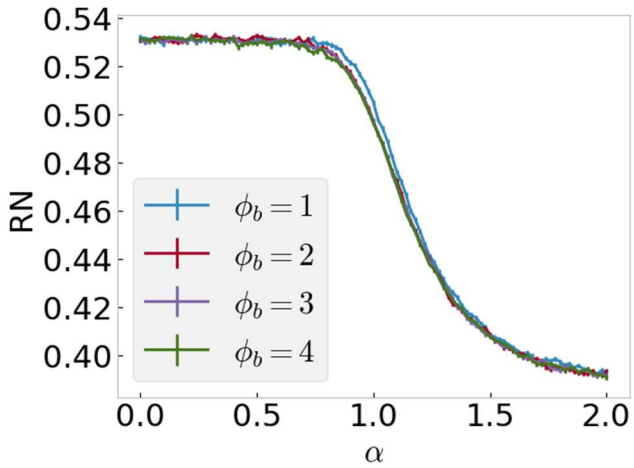

Fig. 1 Plot of the RN as α changes. In this calculation, system size is 1000, and we made statistical average over 1000 samples.

شکل ۳ نمودار رفتار RN بر حسب تغییرات α. در این محاسبات اندازه‌ی سامانه برابر با ۱۰۰۰ در نظر گرفته شده و بر روی تعداد ۱۰۰۰ نمونه آماری متوسط گرفته شده است.

۸. RN بر حسب ϕ_b

برای مقادیر مختلف α، رفتار RN نسبت به ϕ_b. مورد بررسی قرار گرفته است. در مقدار کوچک $\alpha = 0.5$، مشاهده می‌شود که RN تغییر خاصی ندارد و سامانه همواره در فاز گسترده باقی می‌ماند. برای $\alpha = 1$، تغییراتی در RN مشاهده می‌شود، اما این تغییرات به‌گونه‌ای نیستند که به روشنی گذار فاز از حالت گسترده به موضعی را نشان دهند، بلکه نمایانگر حالتی بینابینی هستند. در پایان برای $\alpha = 1.5$، مقدار RN نشان می‌دهد که سامانه همواره در فاز موضعی قرار دارد. این نتایج نیز در شکل (۴) نمایش داده شده است.

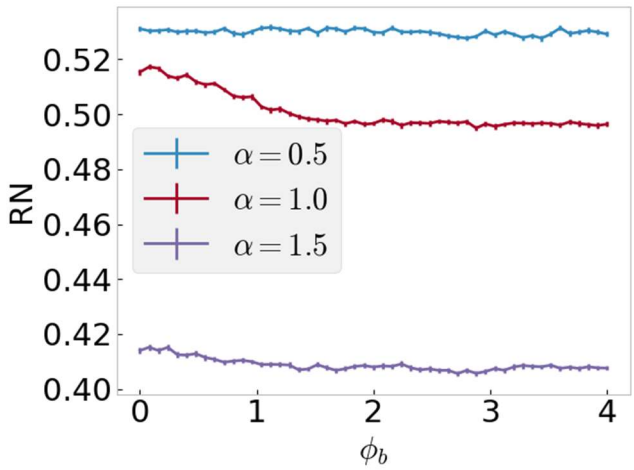

Fig. 1 Plot of the RN as ϕ_b changes. In this calculation, system size is 1000, and we made statistical average over 1000 samples

شکل ۴ نمودار رفتار RN بر حسب تغییرات ϕ_b. در این محاسبات اندازه‌ی سامانه برابر با ۱۰۰۰ در نظر گرفته شده و بر روی تعداد ۱۰۰۰ نمونه آماری متوسط گرفته شده است.

۹. نتیجه‌گیری و پیشنهادات

در این پژوهش، با استفاده از ترکیب الگوهای PRBM و RD، به مطالعه رفتارهای موضعی و انتقالی سامانه پرداخته شد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که با تنظیم کمیت‌های α و ϕ_b، می‌توان سامانه را از حالت گسترده به حالت موضعی تغییر داد و گذار فاز موضعی- انتقالی را به خوبی مشاهده کرد. تحلیل نسبت مشارکت و نسبت فواصل انرژی نشان داد که این الگوی ترکیبی می‌تواند به صورت موثر رفتارهای کوانتومی مرتبط با موضعیت و انتشار را شبیه‌سازی کند. به صورت ویژه، نتایج نشان دادند که افزایش α به صورت موثری سامانه را به سمت موضعیت پیش می‌برد و رفتار طیفی سامانه نیز این گذار را تایید می‌کند.

رفتار کمیت‌های مورد بررسی (نسبت مشارکت و نسبت فواصل انرژی) در این مطالعه به صورت مستقیم با تغییرات کمیت‌های سامانه مرتبط است. این کمیت‌ها نمایانگر دو جنبه کلیدی از سامانه هستند: α کنترل‌کننده دامنه و قدرت جفت‌شدگی بلندبرد است، در حالی که ϕ_b شدت بی‌نظمی روی مکان در انرژی‌های مکان‌ها را مشخص می‌کند. در مقادیر کوچک α، جفت‌شدگی بلندبرد قوی‌تر بوده و الکترون‌ها می‌توانند به راحتی بین مکان‌های دور حرکت کنند. این امر منجر به تشکیل فاز گسترده می‌شود که در آن نسبت مشارکت (PR) مقادیر بزرگ و نسبت فواصل انرژی (RN) نزدیک به ۰.۵۳ (متناظر با توزیع گاوسی) است. با افزایش α، جفت‌شدگی بلندبرد ضعیف‌تر شده و

الکترون‌ها تمایل به موضعی‌شدن در نواحی محدودی از سامانه پیدا می‌کنند. این تغییرات در رفتار سامانه به روشنی در کاهش PR و نزدیک‌شدن RN به ۰/۳۸ (متناظر با توزیع پواسونی) مشاهده می‌شود. از سوی دیگر، افزایش ϕ_b با ایجاد ناهمگنی شدید در انرژی‌های مکان‌ها، موضعی‌سازی الکترون‌ها را تقویت می‌کند. با این حال، تأثیر ϕ_b در مقایسه با α ضعیف‌تر است، زیرا جفت‌شدگی بلندبرد حتی در حضور بی‌نظمی محلی قوی، می‌توانند انتقال الکترون‌ها را تسهیل کنند. این رفتارها نشان‌دهنده آن است که گذار فاز در این سامانه ترکیبی نتیجه تعادل پیچیده بین جفت‌شدگی بلندبرد و بی‌نظمی محلی است.

تغییر کمیت‌های α و ϕ_b تأثیر مستقیمی بر پایداری فازهای گسترده و موضعی دارد. افزایش α سبب کاهش دامنه جفت‌شدگی بلندبرد جفت‌شدگی می‌شود که این امر انتقال الکترون بین مکان‌های دور را محدود می‌کند. در نتیجه، سامانه به سمت ناپایداری فاز گسترده میل کرده و پایداری فاز موضعی تقویت می‌شود. از سوی دیگر، افزایش ϕ_b در الگوی RD، بی‌نظمی محلی را تشدید می‌کند و با ایجاد ناهمگنی شدید در انرژی‌های مکان‌ها، شرایط را برای موضعی‌سازی الکترون‌ها فراهم می‌آورد. این دو روش (کاهش جفت‌شدگی بلندبرد و افزایش بی‌نظمی محلی) به صورت هماهنگ یا رقابتی عمل می‌کنند. هنگامی که α از آستانه بحرانی (که کمابیش برابر با یک است) فراتر می‌رود، حتی در حضور ϕ_b کوچک، سامانه به دلیل غلبه جفت‌شدگی ضعیف، به فاز موضعی فرو می‌رود. این رفتار نشان‌دهنده آن است که α کمیت غالب در کنترل پایداری فاز گسترده است. در مقابل، برای α کوچکتر از مقدار بحرانی افزایش ϕ_b می‌تواند به عنوان عامل محرک گذار فاز عمل کند، اما اثر آن در مقایسه با α ضعیف‌تر است. این یافته‌ها نشان می‌دهند که پایداری فازهای سامانه نتیجه تعادل ظریف بین جفت‌شدگی بلندبرد (توسط α تنظیم می‌شود) و بی‌نظمی محلی (توسط ϕ_b کنترل می‌گردد) است.

این مطالعه یکی از اولین کارهایی است که به بررسی ترکیب دو الگوی RD و PRBM می‌پردازد. در پژوهش‌های قبلی، این دو الگو به صورت جداگانه مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. برای مثال، در الگوی RD، مطالعات نشان داده‌اند که جایگزینی تصادفی اتم‌ها یا مولکول‌ها می‌تواند به موضعی‌سازی الکترون‌ها در نواحی خاصی از سامانه منجر شود. در این کار نیز مشاهده شد که افزایش کمیت ϕ_b (که شدت بی‌نظمی محلی را کنترل می‌کند) سبب کاهش نسبت مشارکت و نزدیک‌شدن سامانه به فاز موضعی می‌شود. این نتیجه با یافته‌های قبلی در الگوی RD همخوانی دارد.

از سوی دیگر، در الگوی PRBM، مطالعات نشان داده‌اند که با افزایش کمیت α (که دامنه جفت‌شدگی بلندبرد را کنترل می‌کند)، سامانه از فاز گسترده به فاز موضعی گذار می‌کند. در این کار نیز مشاهده شد که افزایش α به صورت موثری سبب کاهش نسبت مشارکت و تغییر RN از مقادیر نزدیک به ۰.۵۳ (متناظر با فاز گسترده) به مقادیر نزدیک به ۰.۳۸ (متناظر با فاز موضعی) می‌شود. این رفتار با نتایج قبلی در الگوی PRBM سازگار است. با این حال، ترکیب این دو الگو در این مطالعه نشان داد که تعامل بین بی‌نظمی‌های محلی و بلندبرد می‌تواند رفتارهای پیچیده‌تری را ایجاد کند. برای مثال، مشاهده شد که در مقادیر کوچک α، افزایش ϕ_b تأثیر کمتری بر موضعی‌سازی سامانه دارد، چرا که جفت‌شدگی بلندبرد قوی می‌توانند اثرات بی‌نظمی محلی را تا حدی خنثی کنند. این نتیجه نشان‌دهنده آن است که ترکیب دو الگوی RD و PRBM می‌تواند بینش‌های جدیدی درباره تعامل بین بی‌نظمی‌های کوتاه‌برد و بلندبرد در سامانه‌های کوانتومی ارائه دهد.

با توجه به توانایی این الگو در شبیه‌سازی گذارهای فاز، پژوهش‌های آینده می‌توانند بر روی گسترش و بهبود این الگو متمرکز شوند. پیشنهاد می‌شود که بررسی‌های بیشتری بر روی تأثیر کمیت‌های دیگر و همچنین افزایش پیچیدگی الگو صورت گیرد، از جمله:

- استفاده از هامیلتونی‌هایی با تقارن‌ها و پیچیدگی‌های بیشتری که بتوانند رفتارهای فازهای مختلف را به صورت دقیق‌تر شبیه‌سازی کنند.
- تحلیل الگو در شرایط بافتارهای مختلف که در آن‌ها کمیت‌های تصادفی با وابستگی‌های مکانی و غیرمکانی متفاوت تنظیم شوند.
- مطالعه بر روی سامانه‌های کوانتومی با ابعاد بیشتر و بررسی تأثیرات ابعادی بر روی نتایج.

در نهایت، امکان استفاده از این الگو برای تحلیل گذارهای فاز در سایر سامانه‌های پیچیده مانند سامانه‌های زیستی و مواد نوظهور می‌تواند به عنوان جهت‌گیری جدیدی برای پژوهش‌های آینده مطرح شود. این کار نه تنها به درک بهتر رفتارهای موضعی و انتشار در سامانه‌های کوانتومی کمک می‌کند، بلکه می‌تواند راهگشای پژوهش‌هایی در زمینه مواد هوشمند و نانوفناوری نیز باشد.

منابع

[1] Vojta, T., "Disorder in quantum many-body systems", *Annual Review of Condensed Matter Physics* 10(1), 233-252, 2019. DOI: https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013433

[2] Price, D.L., Saboungi, M.L. and Bermejo, F.J., "Dynamical aspects of disorder in condensed matter", *Reports on Progress in Physics* 66(4), 407, 2003. DOI: https://doi.org/10.1088/0034-4885/66/4/201

[3] Siegrist, T., Jost, P., Volker, H., Woda, M., Merkelbach, P., Schlockermann, C. and Wuttig, M., "Disorder-induced localization in crystalline phase-change materials", *Nature materials* 10(3), 202-208, 2011. DOI: https://doi.org/10.1038/nmat2934

[4] Wang, J.J., Xu, Y.Z., Mazzarello, R., Wuttig, M. and Zhang, W., "A review on disorder-driven metal–insulator transition in crystalline vacancy-rich GeSbTe phase-change materials", *Materials* 10(8), 862, 2017. DOI: https://doi.org/10.3390/ma10080862

[5] Punnoose, A. and Finkel'stein, A.M., "Metal-insulator transition in disordered two-dimensional electron systems", *Science* 310(5746), 289-291, 2005. DOI: https://doi.org/10.1126/science.1115660

[6] Dunlap, D.H., Wu, H.L. and Phillips, P.W., "Absence of localization in a random-dimer model", *Physical Review Letters* 65(1), 88, 1990. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.88

[7] Datta, P.K., Giri, D. and Kundu, K., "Nonscattered states in a random-dimer model", *Physical Review B* 47(16), 10727, 1993. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.10727

[8] Bovier, A., "Perturbation theory for the random dimer model", *Journal of Physics A: Mathematical and General* 25(5), 1021, 1992. DOI: https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/25/5/011

[9] Mirlin, A.D., Fyodorov, Y.V., Dittes, F.M., Quezada, J. and Seligman, T.H., "Transition from localized to extended eigenstates in the ensemble of power-law random banded matrices", *Physical Review E* 54(4), 3221, 1996. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.54.3221

[10] Varga, I. and Braun, D., "Critical statistics in a power-law random-banded matrix ensemble", *Physical Review B* 61(18), R11859, 2000. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.R11859

[11] Bogomolny, E. and Sieber, M., "Power-law random banded matrices and ultrametric matrices: Eigenvector distribution in the intermediate regime", *Physical Review E* 98(4), 042116, 2018. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.042116

[12] Calixto, M. and Romera, E., "Inverse participation ratio and localization in topological insulator phase transitions", *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2015(6), P06029, 2015. DOI: https://doi.org/10.1088/1742-5468/2015/06/P06029

[13] Roy, S., Mishra, T., Tanatar, B. and Basu, S., "Reentrant localization transition in a quasiperiodic chain", *Physical Review Letters* 126(10), 106803, 2021. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.106803

[14] Evers, F. and Mirlin, A.D., "Fluctuations of the inverse participation ratio at the Anderson transition", *Physical review letters* 84(16), 3690, 2000. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.3690

[15] Atas, Y.Y., Bogomolny, E., Giraud, O., Vivo, P. and Vivo, E., "Joint probability densities of level spacing ratios in random matrices", *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 46(35), 355204, 2013. DOI: https://doi.org/10.1088/1751-8113/46/35/355204

[16] Pal, A. and Huse, D.A., "Many-body localization phase transition", *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics* 82(17), 174411, 2010. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.82.174411

This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).