

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

УДК 538.94

Козлов Глеб Геннадьевич

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ И ПРОСТРАНСТВЕННОЕ
СТРОЕНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ
ТРАНСЛЯЦИОННО-НЕСИММЕТРИЧНЫХ
ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР**

Специальность 01.04.02 — теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2015

Оглавление

0.1	ВВЕДЕНИЕ	6
0.2	ОБЗОРНАЯ ЧАСТЬ	21
0.2.1	Связь функции Грина с линейной восприимчивостью	21
0.2.2	Связь функции Грина со спектром поглощения	24
0.2.3	Связь функций Грина с временной динамикой возбуждения	26
0.2.4	Теория возмущений для функции Грина. Уравнение Дайсона.	27
0.2.5	Точнорешаемая модель Ллойда	28
0.2.6	Графическое изображение членов разложения функции Грина	31
0.2.7	Метод Дайсона	32
0.2.8	Метод Дайсона для случая комплексных энергий	36
0.3	ПРОСТРАНСТВЕННО ОГРАНИЧЕННЫЕ МОДЕЛИ. МЕТОД ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ.	41
0.3.1	Метод вычисления спектра поглощения пространственно ограниченных решеток.	42
0.3.2	Прохождение света через слоистую систему в экситонной области спектра	53
0.3.3	Рассеяние света назад конечной двумерной кристаллической пластинкой в области экситонного резонанса – антизеркальное отражение	62

0.4	РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ. СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ. СТАТИСТИКА ФУНКЦИИ ГРИНА.	74
0.4.1	Спектр поглощения одномерной цепочки с экситоном Френкеля при диагональном беспорядке в виде гиперболических дефектов	75
0.4.2	Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы с бинарным или равномерным диагональным беспорядком .	84
0.4.3	Коррелированная модель Ллойда: точное решение	102
0.5	ВЫЧИСЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В СМЫСЛЕ КРИТЕРИЯ АНДЕРСОНА ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ ДИАГОНАЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ.	114
0.5.1	Постановка задачи и основные результаты	114
0.5.2	Статистика функций Грина	118
0.5.3	Бинарный беспорядок	121
0.5.4	Произвольный малый диагональный беспорядок	127
0.5.5	Численный эксперимент	130
0.5.6	Приложение 1	134
0.5.7	Приложение 2	139
0.6	СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЕ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЕЙ	146
0.6.1	Постановка задачи и основные результаты	146
0.6.2	Статистика функций Грина	150
0.6.3	Вычисление вклада $\langle x_1 y_2 \rangle$	155
0.6.4	Теория возмущений для уравнения (450)	156
0.6.5	Точки делокализации	159

0.6.6	Численный эксперимент	161
0.7	СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ЛЛОЙДА	165
0.7.1	Введение, постановка задачи и основные результаты	165
0.7.2	Расчет	167
0.7.3	Заключение	173
0.7.4	Приложение 3	175
0.8	СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С КУСОЧНО ПОСТОЯННЫМ СЛУЧАЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ	178
0.8.1	Введение, постановка задачи и основные результаты	178
0.8.2	Непрерывная модель. Общие свойства функций Грина уравнения Шредингера.	180
0.8.3	Случай кусочно постоянного потенциала. Рекуррентное соотношение для краевой функции Грина.	182
0.8.4	Вычисление спектральной зависимости степени локализации $W(U)$	185
0.8.5	Численный эксперимент. Длина локализации.	190
0.8.6	Заключение	196
0.8.7	Приложение 4. Решение спектральной задачи для оператора $\mathcal{H}_{\Omega,\eta}$	197
0.9	ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КРИТЕРИЯ ЛОКАЛИЗАЦИИ АНДЕРСОНА В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ПРИ КОРРЕЛИРОВАННОМ ДИАГОНАЛЬНОМ БЕСПОРЯДКЕ.	200
0.9.1	Введение, постановка задачи и основные результаты.	200
0.9.2	Приближение больших радиусов корреляции	205
0.9.3	Заключение	209

0.10 МЕТОД СЛЕДЯЩИХ ОПЕРАТОРОВ В ТЕОРИИ ЭКСИТОНА ФРЕНКЕЛЯ. НОВАЯ МЕРА ЛОКАЛИЗАЦИИ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И ЕЕ ТОЧНОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ДЛЯ 0-СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ НЕДИАГОНАЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ ЦЕПОЧКИ.	211
0.10.1 Постановка задачи	212
0.10.2 Следящие операторы	215
0.10.3 Исследование 0-состояния экситона Френкеля методом следящих операторов	219
0.11 Благодарности	230

0.1 ВВЕДЕНИЕ

Большинство математических моделей современной физики строятся на основе той или иной симметрии, присущей изучаемой системе. Теория атома, например, использует сферическую симметрию атомных систем, что позволяет даже при изучении чрезвычайно сложных многочастичных моделей атома ввести эффективную классификацию состояний по полному угловому моменту количества движения, и получить целый ряд точных результатов, касающихся зависимости матричных элементов тензорных операторов от квантовых чисел углового момента [1, 2]. Теория твердого тела строится на основе экспериментально наблюдаемой у многих конденсированных систем трансляционной симметрии, позволяющей с помощью теоремы Блоха (см., например, [3, 4, 5]) ввести классификацию состояний по волновому вектору (квазиимпульсу). Это дает возможность с высокой степенью убедительности обосновать твердотельные модели, сводящие электронное движение в твердых телах к модели идеального газа с перенормированным законом дисперсии одночастичного спектра, которые (модели) являются основными в современной теории кристаллических металлов, полупроводников и диэлектриков. Оба этих типа симметрии (сферическая и трансляционная) используются также в фундаментальных теориях материи – теории взаимодействующих полей.

Из приведенных примеров видно, что наличие симметрии, в частности трансляционной, является типичным для физических систем и используется при построении соответствующих математических моделей. Несмотря на это, можно указать случаи, когда возникающие математические модели такой симметрией не обладают. Среди этих моделей важное место занимают модели, возникающие в физике твердого тела и именно они являются предметом исследования данной диссертационной работы.

К числу таких моделей принадлежат прежде всего модели *конечных* (ограниченных) твердотельных систем, трансляционно-несимметричных именно из-за наличия границ. Такие модели используются при анализе твердотельных систем настолько малого размера, что применение к ним результатов, полученных для бесконечных трансляционно-симметричных систем путем построения удельных характеристик становится некорректным. К системам такого типа можно отнести квантовые ямы, квантовые проволоки, квантовые точки, J -агрегаты [6, 7, 8, 9, 10]. Теплоемкость и спектр оптической восприимчивости

таких систем в значительной степени отличается от соответствующих удельных величин бесконечных систем и нарушение трансляционной симметрии, связанное с конечностью этих объектов (см., например, [11]), должно быть учтено при построении математических моделей для их описания.

Здесь уместно отметить, что нарушение трансляционной симметрии оказывается важным не только в случаях, когда предметом исследования являются малые фрагменты однородных систем, но и при рассмотрении полубесконечных систем. Задача об отражении света кристаллом в области экситонного поглощения дает пример того, когда нарушение трансляционной симметрии вызванное наличием всего *одной* границы должно быть учтено при расчете оптической восприимчивости, т.е. на стадии постановки задачи. Неучет этого нарушения приводит к тому, что постановка указанной задачи становится противоречивой. Несмотря на то, что задачи об отражении являются классическими для оптики [12, 13], их исследование в спектральных областях экситонного поглощения, в условиях большой пространственной дисперсии, сохраняет известную актуальность и в настоящее время.

К числу твердотельных моделей, не обладающих трансляционной симметрией и вызывающих наибольшие трудности при анализе следует отнести модели *неупорядоченных систем*. Первым примером моделей такого типа могут служить модели, возникающие при рассмотрении сплавов и стекол, трансляционно-симметричных лишь в среднем. Другим примером являются модели, возникающие при рассмотрении колебаний ядер в изотопически неоднородном кристалле, которые также не могут быть охарактеризованы трансляционной симметрией в силу случайного характера расположения ядер с различными массами. В качестве третьего (и далеко не последнего) примера моделей неупорядоченных систем можно указать модели, описывающие движение электронов по примесным атомам в полупроводниках.

Несмотря на то, что перечисленные выше неупорядоченные системы в *среднем* являются однородными, отсутствие строгой трансляционной симметрии делает невозможным введение упомянутой выше классификации состояний по квазиимпульсу при их анализе и делает некорректными полученные на ее основе результаты. Случайный характер неупорядоченных систем и невозможность введения в соответствующих моделях эффек-

тивной классификации состояний затрудняет даже постановку задачи, которая для симметричных систем обычно заключается в отыскании энергетического спектра и собственных функций некоторого модельного трансляционно-симметричного гамильтониана¹ (при этом и собственные значения и собственные состояния ищутся как функции квазиимпульса – классификатора, возникающего вследствие трансляционной симметрии) с последующим вычислением интересующих наблюдаемых величин. В случае неупорядоченной системы энергетический спектр и собственные функции зависят от большого числа случайных параметров и поиск явного вида этой зависимости представляется неразрешимой задачей. По этой причине уже на стадии постановки задачи следует ориентироваться непосредственно на какую-либо наблюдаемую величину, и придавать смысл усредненному по случайным параметрам изучаемой системы значению этой наблюдаемой. Поясним сказанное следующим примером.

Допустим, что требуется вычислить колебательную теплоемкость твердотельной системы в модели связанных упругими силами одинаковых точечных масс m , положения равновесия которых образуют некоторую трансляционно-симметричную решетку. Эта теплоемкость выражается через плотность $\rho(\omega)$ спектра частот нормальных мод колебаний рассматриваемой системы. Поскольку мы пока имеем дело с трансляционно-симметричной системой, то нормальные моды представляют собой плоские звуковые волны (теорема Блоха), причем частота ω нормальной моды является некоторой функцией волнового вектора \mathbf{k} соответствующей плоской волны. Эта функция называется законом дисперсии волн и в простейшем случае $\omega(\mathbf{k}) = c|\mathbf{k}|$, где c – скорость звука. В этом случае количество нормальных мод, приходящихся на единичный объем \mathbf{k} -пространства, есть константа и плотность спектра частот нормальных колебаний несложно определить и вычислить теплоемкость. Подобные расчеты составляют содержание классической теории теплоемкости Дебая [14].

Введем теперь в эту модель изотопический беспорядок, т.е. будем считать, что массы, соответствующие некоторым узлам решетки $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ равны $m' \neq m$. В этом случае теорема Блоха не работает, мы уже не можем сказать, что нормальными модами являются плоские волны, понятие закона дисперсии теряет смысл, а спектральная плотность

¹При рассмотрении колебательных задач ищется спектр и собственные векторы *динамической матрицы* причем в случае трансляционно симметричных систем ее элементы зависят от разности индексов.

частот нормальных мод становится функцией положения изотопов $\rho(\omega) \rightarrow \rho(\omega, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, отыскание явного вида которой представляется безнадежно трудной задачей. Поэтому при анализе подобной задачи, по-видимому, следует сразу ориентироваться на вычисление теплоемкости (или сглаженной спектральной плотности), усредненной по положениям $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ изотопов, тем более, что такая задача представляется наиболее осмысленной с физической точки зрения.

Таким образом, для трансляционно-неинвариантных моделей неупорядоченных систем представляет особый интерес построение вычислительных схем, в которых стадия определения собственных состояний может быть опущена. Попытки построения таких схем наталкиваются на значительные математические трудности и, по мнению автора, универсальных подходов к подобным задачам (аналогичных подходам, основанных на теореме Блоха в теории трансляционно-симметричных систем) на сегодняшний день не существует, а соответствующие разделы теории твердого тела находятся в стадии накопления информации. На этой стадии анализ даже предельно упрощенных неупорядоченных моделей, представляет интерес, если этот анализ дает надежную и нетривиальную информацию о модели.

С методической точки зрения одним из перспективных подходов к построению упомянутых выше вычислительных схем является подход, основанный на использовании функций Грина. Этот подход применяется в теории взаимодействующих полей (например, в квантовой электродинамике) и в квантовополевой теории трансляционно-симметричных твердотельных моделей, где указанные функции играют основополагающую роль. Удобство такого подхода для твердотельных задач заключается с одной стороны в том, что функция Грина непосредственно дает (с точностью до множителя) восприимчивость системы [3], наблюдаемую в опытах по линейной спектроскопии, а с другой – в том, что для функций Грина оказывается возможным развить теорию возмущений, использующую такие эффективные квантово-полевые методические приемы, как диаграммное разложение и перенормировка. В теории трансляционно-симметричных твердотельных моделей применение аппарата функций Грина особенно эффективно, когда твердое тело рассматривается как резервуар, в котором сосуществуют (до известной степени независимо) поступательное движение электронов и колебательное движение ядер. При переходе к квантовомеханиче-

ским представлениям электронам ставится в соответствие фермионное поле, частицами которого являются, собственно, электроны с зонным (локально параболическим) законом дисперсии, а колебательному движению ядер – бозонное поле, частицы которого (фононы) имеют в простейшем случае линейный (звуковой) закон дисперсии. После этого задача о взаимодействии электронного движения с колебаниями решетки может быть проанализирована методами квантовой электродинамики, рассматривающей взаимодействие электронного и фотонного полей (см., например, [3, 15]). При этом возникает понятие функций распространения – пропагаторов. Предельно упрощая, можно пояснить это понятие следующим образом. Рассмотрим, например, изолированное (свободное) электронное поле. Этому полю соответствует электронная функция Грина, описывающая восприимчивость (и, разумеется, распространение) электронов в пренебрежении взаимодействием с фононами. Электронной функцией распространения (электронным пропагатором) называется то, во что превращается электронная функция Грина при включении взаимодействия с бозонным полем (фотонами или фононами). Грубо говоря, это функция Грина электронов, в которой выполнено усреднение по степеням свободы, связанным с бозонным полем. При этом часто получается, что такая функция приближенно имеет вид функции Грина изолированных электронов, но с измененным (перенормированным) законом дисперсии. Появляется, например, энергетический сдвиг, изменяется параметр закона дисперсии, соответствующий массе электрона.

Применение аппарата функций Грина в теории неупорядоченных моделей основано на том, что беспорядку, введенному в исходную трансляционно-симметричную систему, можно сопоставить некоторое поле, с которым исходное движение трансляционно-симметричной системы вступает во взаимодействие, но по степеням свободы которого (случайным параметрам беспорядка) необходимо произвести усреднение. При этом по аналогии с описанными выше свойствами пропагаторов, можно ожидать, что усредненная функция Грина неупорядоченной модели будет характеризоваться некоторым эффективным законом дисперсии. Замечательно, что в теории разупорядоченных моделей существует точнорешаемая модель Ллойда [16], для которой строго получается, что усредненная по беспорядку функция Грина неупорядоченной системы, действительно имеет вид функции Грина трансляционно-симметричной системы с комплексно-значным энергетическим сдвигом. Строго обобщить результаты Ллойда на более широкий класс моделей

не удается, однако методы построения эффективного закона дисперсии для усредненной функции Грина неупорядоченной системы, занимают важное место в теории [19].

Чрезвычайно важным свойством функции Грина является то, что она непосредственно дает две важнейшие наблюдаемые величины – плотность энергетического спектра (плотность состояний) и спектр линейной восприимчивости. Уже здесь уместно напомнить, что плотность состояний $\rho(E)$ матрицы \mathbf{H} (возможно, случайной) выражается через связанную с ней функцию Грина (резольвентную функцию $\mathbf{G}(E)$)

$$\mathbf{G}(E) = (E - \mathbf{H})^{-1}, \quad (1)$$

следующим образом ²:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im Sp} \langle \mathbf{G}(E + i\delta) \rangle \quad (2)$$

Угловые скобки здесь обозначают усреднение по реализациям матрицы \mathbf{H} , которая может быть случайной.

Можно сказать, что функция Грина является "более наблюдаемой" чем получаемые в результате решения спектральной задачи собственные функции и собственные значения, которые связаны с наблюдаемыми величинами иногда довольно громоздкими вычислениями. Обратим здесь внимание на отличие плотности состояний при энергии E (среднего числа энергетических уровней, приходящегося на единичный энергетический интервал около энергии E) от энергетического спектра – некоторым образом пронумерованных собственных энергий задачи. В приложениях (например, при вычислении термодинамических величин), как правило, интересуются именно плотностью состояний, которую из энергетического спектра еще нужно получить. Те же замечания можно сделать относительно отличия спектра поглощения от набора матричных элементов и частот переходов. Точное решение Ллойда дает пример того, когда вычисление плотности состояний и спектра поглощения методом функций Грина оказывается возможным в случае, когда о решение спектральной задачи не может быть и речи. Заметим здесь, что полученное в диссертационной работе точное решение *коррелированной* модели Ллойда дает еще один пример

²Эту формулу можно получить записав фигурирующий в ней $\text{Sp} \mathbf{G}(E + i\delta)$ в представлении собственных векторов матрицы \mathbf{H} : $-\text{Im} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Sp} \mathbf{G}(E + i\delta) = -\text{Im} \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_i 1/(E + i\delta - E_i) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \sum_i \delta/[\delta^2 + (E - E_i)^2] = \pi \sum_i \delta(E - E_i) = \pi \rho(E)$. Суммирование здесь идет по собственным значениям E_i матрицы \mathbf{H} .

самоценности метода функций Грина в теории разупорядоченных систем.

Применение функций Грина оказывается удобным и при анализе упомянутых выше ограниченных систем или систем, имеющих внутренние границы. Несмотря на то, что в этих случаях иногда оказывается возможным решить спектральную задачу, методически более выгодно сразу направить усилия на вычисление непосредственно функции Грина, поскольку, как уже было отмечено, она простым образом связана с теми характеристиками системы, которыми обычно интересуются – с плотностью состояний и спектром линейной восприимчивости. В диссертационной работе приводятся примеры эффективного использования функций Грина при анализе ограниченных и слоистых систем.

Наконец отметим, что применение функций Грина оказывается также весьма эффективным при исследовании транспорта возбуждения (или частицы) в моделях неупорядоченных систем. При этом используется восходящий к теории потенциала канонический смысл функций Грина, как объектов, описывающих динамику возбуждения, первоначально (при $t = 0$) сосредоточенного в некоторой точке. Эти задачи отличаются особой сложностью, поскольку требуют вычисления среднего значения произведения сразу двух функций Грина – опережающей и запаздывающей, – отличающихся знаком мнимых частей энергетических аргументов. Это, в свою очередь, требует разработки методов расчета совместной статистики двух функций Грина в неупорядоченных моделях. На этом пути автором был получен ряд результатов, которые составляют содержание второй половины диссертационной работы. Те из них, которые касаются вычисления критерия Андерсона и спектральной зависимости степени локализации состояний в одномерных неупорядоченных системах, являются, по мнению автора, наиболее важными в данной работе.

Задача, исследованная в диссертации. Актуальность. План диссертации

Перейдем теперь к формулировке **конкретной задачи**, которая исследуется в диссертационной работе. Эта задача возникает, например, при рассмотрении простейшей модели неупорядоченной системы, связанной с понятием экситона Френкеля, которую мы сейчас кратко опишем. Рассмотрим набор N двухуровневых атомов, расположенных в узлах

некоторой трансляционно-симметричной решетки³. Основное состояние $|\Psi_0\rangle$ такой системы соответствует отсутствию возбужденных атомов. Из возможных $2^N - 1$ возбужденных состояний рассматриваемой системы нас будут интересовать только N нижайших состояний, которым соответствует наличие всего одного возбужденного атома. Мы обозначим эти состояния $|\mathbf{r}\rangle$ (здесь \mathbf{r} – координата узла решетки, где находится возбужденный атом), а об их совокупности будем говорить как об *узельном представлении*. Будем считать, что двухуровневый атом, занимающий узел \mathbf{r} , характеризуется расщеплением уровней $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ и введем некоторое межатомное взаимодействие (гамильтониан которого обозначим \mathcal{W}), способное переносить возбуждение с одного атома на другой. Тогда матрица полного гамильтониана \mathcal{H} такой совокупности двухуровневых атомов в узельном представлении будет иметь вид:

$$\langle \mathbf{r} | \mathcal{H} | \mathbf{r}' \rangle \equiv H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \varepsilon_{\mathbf{r}} + \langle \mathbf{r} | \mathcal{W} | \mathbf{r}' \rangle \quad (3)$$

Всюду ниже мы будем считать свойства взаимодействия \mathcal{W} однородными по всей решетке двухуровневых атомов, что приводит к тому, что функция $\langle \mathbf{r} | \mathcal{W} | \mathbf{r}' \rangle$ оказывается зависящей только от разности своих аргументов: $\langle \mathbf{r} | \mathcal{W} | \mathbf{r}' \rangle = w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}$, причем вид функции $w_{\mathbf{r}}$ определяется механизмом взаимодействия \mathcal{W} . Как правило, функция $w_{\mathbf{r}}$ зависит от модуля \mathbf{r} и убывает, причем характер убывания зависит от конкретного вида взаимодействия \mathcal{W} . В типичных случаях обменного и дипольного взаимодействий, убывание имеет соответственно экспоненциальный $\sim \exp(-|r|/R)$ и степенной $\sim 1/|r|^3$ характер.

Таким образом, отсутствие трансляционной симметрии рассматриваемой модели может быть связано только с неодинаковостью узельных энергий $\varepsilon_{\mathbf{r}}$, представляющих собой диагональные элементы гамильтониана (3). По этой причине говорят, что такой тип моделей характеризуется *диагональным беспорядком*.⁴ Матрица гамильтониана диагонально неупорядоченной модели имеет вид:

$$\langle \mathbf{r} | H | \mathbf{r}' \rangle = H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \varepsilon_{\mathbf{r}} + w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \quad (4)$$

В частном случае отсутствия беспорядка все узельные энергии равны между собой $\varepsilon_{\mathbf{r}} = \varepsilon = \text{const}$ и гамильтониан (4) диагонализуется в представлении блоховских волн, причем

³Число N мы считаем большим, но конечным, поэтому решетку нужно считать циклической.

⁴Недиагональным называют беспорядок, соответствующий пространственной неоднородности взаимодействия \mathcal{W} . При этом величины $\langle \mathbf{r} | \mathcal{W} | \mathbf{r}' \rangle$ уже нельзя считать зависящими только от разности $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

собственные векторы-столбцы $|\mathbf{q}\rangle$ ⁵ и собственные энергии $E_{\mathbf{q}}$ "нумеруются" волновым вектором \mathbf{q} и имеют соответственно вид:

$$|\mathbf{q}\rangle_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad E_{\mathbf{q}} = \varepsilon + \sum_{\mathbf{r}} w_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (5)$$

Как известно[3, 5, 15], возможные значения волнового вектора \mathbf{q} находятся в зоне Бриллюэна рассматриваемой решетки и в случае простой кубической решетки с постоянной b , все компоненты \mathbf{q} принимают эквидистантный ряд значений в промежутке $[-\pi/b, \pi/b]$, с таким расчетом, чтобы полное число собственных векторов было бы равно N . Ясно, что волновой вектор \mathbf{q} и является тем присущим трансляционно-симметричным системам классификатором состояний (квазиимпульсом), о котором шла речь выше. Собственным состояниям (5) гамильтониана (4) можно сопоставить свободное движение некоторой квазичастицы, причем величина \mathbf{q} может рассматриваться как квазиимпульс. Эту квазичастицу и называют *экситоном Френкеля*[17, 18]. При нарушении трансляционной симметрии (т.е. в случае, когда $\varepsilon_{\mathbf{r}} \neq const$) возникает отклонение движения экситона Френкеля от свободного, описывающегося плоскими волнами (5) – он, как говорят, испытывает рассеяние на нарушениях трансляционной симметрии.

Описанная модель экситона Френкеля является далеко не единственной, приводящей к матрицам вида (4). Матрицы такого типа возникают также при исследовании колебаний решетки, одночастичного электронного спектра в модели сильной связи, распространения электромагнитных волн в длинных линиях, составленных из элементов с флуктуирующими параметрами и др.

Меняя распределение узельных энергий $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ в (4), можно получать модели трансляционно-несимметричных систем обоих типов, описанных во Введении. Пусть, например, требуется проанализировать *конечную* твердотельную систему, представляющую собой фрагмент трансляционно-симметричной системы, занимающий некоторую пространственную область F . Такой системе соответствует модельная матрица вида (4), в которой

$$\varepsilon_{\mathbf{r}} = \begin{cases} \text{const} & \text{при } \mathbf{r} \in F \\ \infty & \text{в другом случае.} \end{cases} \quad (6)$$

При этом формально матрица (4) может быть задана на трансляционно-симметричной циклической решетке узлов, содержащей фрагмент F , однако возбуждение (или частица)

⁵Каждая компонента $|\mathbf{q}\rangle_{\mathbf{r}}$ вектора столбца $|\mathbf{q}\rangle$ имеет векторный номер \mathbf{r} .

не может выйти из области F в силу бесконечной величины энергетической "отстройки" атомов, находящихся вне F . В качестве области F можно выбрать слой некоторой толщины – при этом получается модель квантовой ямы. Областью F может быть также сфера, моделирующая квантовую точку.

При использовании матриц типа (4) для моделирования *неупорядоченных систем* (пространственно однородных в среднем) обычно полагают величины ε_r случайными, причем с заданной статистикой (функцией распределения) $P(\varepsilon)$. При этом, в простейшем случае, величины ε_r считают некоррелированными, т.е.

$$\langle \varepsilon_{\mathbf{r}} \varepsilon_{\mathbf{r}'} \rangle = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \int P(\varepsilon) \varepsilon^2 d\varepsilon \quad (7)$$

В этом случае матрица (4) сама становится случайной и все связанные с ней величины, представляющие интерес, должны быть усреднены.

Трансляционно-несимметричные твердотельные модели, связанные с матрицами типа (4), являются предметом исследования настоящей диссертационной работы.

Актуальность. Поскольку для исследования матриц указанного типа в диссертации применяется метод функций Грина, то многие из полученных в работе результатов имеют смысл величин, наблюдаемых в трансляционно-несимметричных системах, описываемых диагонально разупорядоченным гамильтонианом (4). Отметим, что несмотря на простоту вида матрицы (4), ее анализ встречает все те трудности, о которых говорилось во Введении. Эта матрица моделирует целый класс неупорядоченных систем, наука о которых, как уже отмечалось, в значительной степени находится в стадии накопления данных, поэтому *любая* нетривиальная и достоверная информация о свойствах этой матрицы и связанных с ней величинах представляется ценной. По всем этим причинам исследования, проведенные в диссертационной работе, представляются актуальными.

Не ограничивает актуальности работы и то, что основное внимание в диссертации уделено одномерным трансляционно-несимметричным моделям. Как известно, математические модели беспорядка в одномерных системах имеют эвристическое значение, в силу чего указанные модели составляют важную часть теории разупорядоченных систем [19] и продолжают активно исследоваться в настоящее время [44, 45, 46, 20, 21]. Кроме того, одномерные модели применяются при изучении J -агрегатов [6, 7, 8, 9, 10], при описании

дефектов в кристаллах [59, 60], при расчетах оптических волокон и др. Актуальность изучения одномерных моделей связана также и с тем, что современные технологии позволяют создавать такие низкоразмерные структуры как квантовые проволоки, квантовые сверхрешетки, фотонные кристаллы и др., для описания которых одномерные модели могут быть с успехом использованы.

В нашей диссертационной работе матрицы типа (4), как правило (исключением является материал Главы 9), имеют смысл гамильтониана некоторой модельной системы. К исследованию похожих матриц приводят задачи "некогерентного" переноса возбуждения в конденсированных системах [57, 58]. В этом случае матрицы кинетических уравнений, описывающих указанный перенос, как правило, имеют "составляющую" вида (4) и в разложениях соответствующих функций Грина всегда имеются подпоследовательности, являющиеся функциями Грина матриц вида (4). По этой причине исследование матриц (4) является актуальным и для этого круга задач.

План диссертации.

Диссертация построена следующим образом. Во введении и первой главе формулируется задача диссертационной работы (с обоснованием ее актуальности) и приводится обзор результатов, полученных другими авторами по тематике диссертации. Чтобы упростить восприятие диссертационной работы и придать ей замкнутость, те из этих результатов, которые используются в оригинальной части, излагаются подробно. При изложении этого материала мы не всегда следуем первоисточникам, предлагая свои варианты выводов формул, что позволяет (по нашему мнению) привести сведения, необходимые для понимания оригинальной части работы, в более простой и связной форме. Заметим, что приведенное в конце первой главы обобщение метода Дайсона для статистики функции Грина на случай систем с неограниченным спектром и точное решение задачи Ллойда методом Дайсона, по имеющимся у автора сведениям, никогда не освещались в литературе и являются оригинальными. Однако, поскольку этот материал имеет чисто методический характер, мы включили его в обзорную часть диссертационной работы.

Глава 2 посвящена разработке методов анализа систем, в которых нарушение трансляционной симметрии связано с их пространственной ограниченностью. В этой части диссертации производится моделирование таких систем матрицами типа (4) и разрабатывается

метод дифференциального уравнения для нахождения соответствующих функций Грина и связанных с ними спектров восприимчивости. После этого приводятся решения ряда модельных задач, демонстрирующие эффективность разработанной методики. Сюда относится задача о конечной линейной цепочке, задача о цепочке со скачком расщепления и задача о трехмерном сферическом кластере. Во всех этих случаях для спектра поглощения получаются аналитические формулы. Заметим, что даже для простейшего случая конечной цепочки, решение спектральной задачи для соответствующей матрицы (4) с экспоненциальной функцией $w(r)$ (по сведениям автора) неизвестно. Предложенный метод дифференциального уравнения для функции Грина оказывается удобным для вычисления компонент функции Грина, соответствующих длинноволновым экситонам. В качестве примера в диссертации решена задача об отражении и пропускании света кристаллической пластинкой с экситонным характером возбуждений. При этом удалось последовательно преодолеть известные трудности, связанные с дополнительными условиями для добавочной волны. В заключение этой главы описывается предложенный автором эффект антизеркального отражения, расчет которого выполнен с использованием предложенной методики нахождения восприимчивости пространственно ограниченных систем.

В третьей главе диссертационной работы приводятся оригинальные результаты автора, полученные при изучении *спектральных* свойств бесконечных (или полубесконечных) неупорядоченных одномерных систем. Сюда, во-первых, относится расчет спектра поглощения одномерной модели с гиперболическими дефектами – этот материал примыкает к задачам, рассмотренным во второй главе, поскольку исследования спектра производятся методом дифференциального уравнения для функции Грина. Далее приводятся результаты автора по исследованию статистики функций Грина в одномерных моделях с бинарным и равномерным типом диагонального беспорядка. При этом формулируются алгоритмы вычисления указанной статистики с возможностью аналитического продолжения усредненных функций Грина на область спектра. Приводятся примеры вычисления плотности состояний и описывается предложенный в работе эффективный способ расчета статистики краевой функции Грина системы с равномерным диагональным беспорядком, позволяющий получить аналитическое выражение для границ спектра. Наконец, в этой, третьей, посвященной спектральным свойствам разупорядоченных систем, главе диссертации приводится полученное автором точное решение для усредненной функции Грина

на коррелированной модели Ллойда. Приведены примеры, когда для точной плотности состояний коррелированной разупорядоченной системы получаются аналитические выражения. Показана нетривиальная масштабная инвариантность коррелированной модели Ллойда, выражающаяся в независимости плотности спектра гамильтониана модели от параметра, играющего роль эффективного корреляционного радиуса.

Главы диссертации с четвертой по восьмую включительно посвящены *локализационным* свойствам одномерных разупорядоченных систем.

В четвертой главе изучается динамика распада возбуждения в неупорядоченных одномерных моделях. Для постановки и решения задач этого класса автором был обобщен метод Дайсона. В рамках указанного обобщения было получено замкнутое уравнение, определяющее совместную статистику опережающей и запаздывающей функций Грина, установлена связь этой статистики с критерием локализации Андерсона, введены новые величины (*функции участия*), позволяющие судить о степени локализации состояний системы в зависимости от их энергии. Для решения уравнений, определяющих совместную статистику опережающей и запаздывающей функций Грина, была построена последовательная теория возмущений. С помощью этой теории были получены аналитические выражения для степени локализации и функции участия бинарно неупорядоченной системы с малой концентрацией дефектов и произвольной их энергией, а также для случая слабо разупорядоченных одномерных моделей общего вида.

В пятой главе диссертации описывается обобщение разработанной в четвертой главе методики расчета степени локализации на случай разупорядоченной модели со сложной структурной единицей – однородным фрагментом связанных между собой $m > 1$ двухуровневых систем. Показано, что спектральное распределение степени локализации состояний в такой модели характеризуется появлением $m - 1$ энергетической *точки делокализации*, где состояния (во втором порядке теории возмущений) делокализованы. Приводится анализ следующего (четвертого) порядка теории возмущений и показывается, что в этом порядке степень локализации в "точках делокализации" расходится, что приводит к замене "нулей" степени локализации (функции участия) в этих точках на узкие (при малой степени разупорядочения) максимумы.

В шестой главе метод совместной статистики функций Грина, развитый в предыдущих

двух главах для случая быстро убывающих функций распределения узельных энергий, обобщается на случай разупорядоченных цепочек со статистикой узельных энергий, не имеющей конечных четных моментов кроме нулевого. Развитый подход применяется для исследования локализационных свойств модели Ллойда, в которой функция распределения узельных энергий имеет вид функции Коши. При этом получается, что критерий Андерсона *линейно* (а не квадратично, как в случае быстро убывающих распределений) зависит от ширины функции распределения узельных энергий.

В седьмой главе показано, что разработанный метод анализа локализационных свойств собственных состояний одномерных разупорядоченных цепочек допускает обобщение на случай *непрерывной* одномерной системы, описываемой дифференциальным уравнением Шредингера с кусочно-постоянным случайным потенциалом. Для такой модели с помощью надлежащим образом модифицированной методики совместной статистики функций Грина рассчитаны все локализационные характеристики волновых функций, полученные в предыдущих главах для дискретных моделей.

В восьмой главе методом совместной статистики исследуется локализация в коррелированных низкоразмерных моделях. Выводятся уравнения для совместной статистики функций Грина и энергии крайнего узла и устанавливается связь этой статистики с локализационными характеристиками модели. Для коррелированной одномерной цепочки вычисляется критерий Андерсона и спектральная зависимость степени локализации в приближении большого радиуса корреляции.

В девятой, заключительной, главе диссертации описывается разработанный автором метод манипуляции диаграммным разложением функции Грина – метод следящих операторов. Этот метод позволяет контролируемым образом учитывать подпоследовательности диаграмм, обладающих некоторым топологическим признаком, с весом, определяемым этим признаком. Такая модификация диаграммного разложения позволяет превратить функцию Грина трансляционно-симметричной модели (известную в явном виде) в такую для моделей, такой симметрией не обладающей. Метод состоит в замене входящих в трансляционно-симметричную функцию Грина элементов матрицы (4) на специально построенные операторы. Жизнеспособность предложенного подхода демонстрируется на ряде простых примеров, после чего методом следящих операторов решается задача о степени

локализации 0-состояния одномерной недиагонально разупорядоченной цепочки, причем ответ удалось получить в виде точной аналитической формулы.

В заключении этой вводной части сделаем следующее замечание, относящееся к теории трансляционно-несимметричных систем вообще и к данной диссертационной работе в частности. Как уже было отмечено, теория не располагает на сегодняшний день надежными универсальными методами, пригодными для эффективного анализа данных реальных экспериментов с неупорядоченными системами и находится в стадии накопления материала. В такой ситуации особое значение приобретает *численный эксперимент* – прямое компьютерное решение модельных задач, часто сильно упрощенных и имеющих лишь качественное отношение к реальным системам. Фантастические возможности современных компьютеров позволяют за обозримое время проводить прямую диагонализацию матриц типа (4), производить усреднение по реализациям беспорядка и в таком численном эксперименте "наблюдать" произвольные величины, сличая их с полученными для них теоретическими выражениями. На данном этапе развития науки о неупорядоченных системах эксперименты такого рода представляют даже большую ценность, чем реальные эксперименты, поскольку модели реальных систем обычно настолько сложны, что проверка теории (на сегодняшний день еще не достаточно развитой) с их помощью представляется малоубедительной. В этой связи обратим внимание на то, что *подавляющее большинство результатов, полученных в данной диссертации, было успешно проверено компьютерным моделированием*, которое в науке о твердотельных неупорядоченных моделях на современном этапе ее развития играет роль эксперимента.

0.2 ОБЗОРНАЯ ЧАСТЬ

В этом разделе будут приведены необходимые для понимания оригинальной части диссертации сведения о применяемой в работе методике и о результатах по тематике работы, полученных другими авторами. Сюда, в первую очередь, относятся такие известные свойства функций Грина, как их связь с линейной восприимчивостью и спектром поглощения, выражение через эти функции временной динамики плотности возбуждения, первоначально локализованного в точке и уравнение Дайсона в теории возмущений для функций Грина (не путать с уравнением Дайсона для статистики функции Грина!).

Во-вторых, в этой части будут описаны результаты, полученные в работах Ллойда[16] и Дайсона[24], имеющие непосредственное отношение к предмету исследования данной диссертационной работы и использованные автором в оригинальной части.

Наконец, в заключение этой обзорной части будет описано проведенное автором оригинальное исследование, касающееся связи моделей Дайсона и Ллойда. При этом будет показано, что уравнение Дайсона для статистики функции Грина в случае модели Ллойда может быть *точно* решено. Поскольку это исследование на сегодняшний день имеет лишь методический смысл и не привело к существенно новым результатам, мы поместили его в обзорной части диссертационной работы.

0.2.1 Связь функции Грина с линейной восприимчивостью

Во введении уже было отмечено, что функция Грина дает плотность состояний того оператора, резольвентной функцией которого она является. Другим важным свойством функций Грина является их связь с *линейной восприимчивостью* (см., например,[3]). Проследим эту связь на примере матрицы (4) и модели экситона Френкеля в системе двухуровневых атомов, которой она соответствует. Задачу поставим следующим образом. Пусть на рассматриваемую систему двухуровневых атомов, которая находится в основном состоянии $|\Psi_0\rangle$, действует локализованное в точке \mathbf{R} монохроматическое возмущение частоты Ω . Требуется найти поляризацию $\mathcal{P}_{\mathbf{r}}$ в произвольной точке \mathbf{r} рассматриваемой решетки двухуровневых атомов в линейном приближении.

Оператор V , соответствующий указанному локализованному возмущению, мы запишем в виде

$$V = \mathcal{E} \hat{d}_{\mathbf{R}} \sin \Omega t, \quad (8)$$

где $\hat{d}_{\mathbf{R}}$ – оператор дипольного момента двухуровневого атома, находящегося в узле \mathbf{R} решетки, а \mathcal{E} – амплитуда возмущающего поля. Мы будем считать, что поляризация рассматриваемой системы двухуровневых атомов $\mathcal{P}_{\mathbf{r}}$ в произвольной точке \mathbf{r} может быть рассчитана как среднее значение оператора дипольного момента $\hat{d}_{\mathbf{r}}$ атома, находящегося в этом узле:

$$\mathcal{P}_{\mathbf{r}} = \langle \Psi | \hat{d}_{\mathbf{r}} | \Psi \rangle \quad (9)$$

Здесь $|\Psi\rangle$ – волновая функция, описывающая состояние системы. Для простоты мы всюду рассматриваем ту компоненту векторов дипольного момента и поляризации, которая параллельна возмущающему полю \mathcal{E} . Для решения поставленной задачи, требуется найти зависящую от времени волновую функцию Ψ системы в линейном по V приближении. Без потери общности можно считать энергию основного состояния системы равной нулю, а соответствующую волновую функцию Ψ_0 независимой от времени. Пользуясь этим, будем искать возмущенную функцию Ψ в виде:

$$\Psi = \Psi_0 + \Psi_s \sin \Omega t + \Psi_c \cos \Omega t + O(V^2) \quad (10)$$

Здесь существенно то, что величины первого порядка по возмущению (8) $\Psi_{s,c} \sim V$ не содержат основного состояния и могут быть представлены в виде линейных комбинаций узельных функций $|\mathbf{r}\rangle$:

$$\Psi_s = \sum_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle, \quad \Psi_c = \sum_{\mathbf{r}} B_{\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle \quad (11)$$

Подставим (10) в уравнение Шредингера

$$i\hbar \dot{\Psi} = [\mathcal{H} + V] \Psi \quad (12)$$

Ограничиваясь членами $\sim V$ и приравнивая коэффициенты при $\sin \Omega t$ и $\cos \Omega t$ независимо, получаем следующие уравнения на величины $\Psi_{s,c}$:

$$\begin{cases} i\hbar \Omega \Psi_s = \mathcal{H} \Psi_c \\ -i\hbar \Omega \Psi_c = \mathcal{H} \Psi_s + \mathcal{E} \hat{d}_{\mathbf{R}} \Psi_0 \end{cases} \quad (13)$$

Запишем эту систему уравнений в узельном представлении с учетом определений (11):

$$\begin{cases} i\hbar \Omega A_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}'} H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} B_{\mathbf{r}'} \\ -i\hbar \Omega B_{\mathbf{r}} = \sum_{\mathbf{r}'} H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} A_{\mathbf{r}'} + \mathcal{E} d_{\mathbf{R}\mathbf{r}} \end{cases} \quad (14)$$

где $H_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ – элементы матрицы (4). При получении этих формул мы учли, что матричный элемент оператора $\hat{d}_{\mathbf{R}}$ дипольного момента атома в узле \mathbf{R} между узельным состоянием $|\mathbf{r}\rangle$ и основным состоянием Ψ_0 отличен от нуля только в случае, если $\mathbf{r} = \mathbf{R}$:

$$\langle \mathbf{r} | \hat{d}_{\mathbf{R}} | \Psi_0 \rangle = d \delta_{\mathbf{r},\mathbf{R}} \quad (15)$$

Как уже было сказано, мы ограничиваемся рассмотрением *диагонально* неупорядоченных моделей и по этой причине всюду ниже мы будем пренебрегать зависимостью величины этого матричного элемента d от положения атома \mathbf{R} , т.е. будем считать, что двухуровневые атомы отличаются друг от друга только энергетическим расщеплением $\varepsilon_{\mathbf{r}}$, но не видом волновых функций основного и возбужденного состояний.

Вводя векторы-столбцы \mathbf{A}, \mathbf{B} и \mathbf{C} с компонентами $A_{\mathbf{r}}, B_{\mathbf{r}}$ и

$$C_{\mathbf{r}} \equiv \mathcal{E} d \delta_{\mathbf{r},\mathbf{R}} \quad (16)$$

соответственно, систему уравнений (14) можно переписать компактно:

$$\begin{cases} i\hbar\Omega\mathbf{A} = \mathbf{H}\mathbf{B} \\ -i\hbar\Omega\mathbf{B} = \mathbf{H}\mathbf{A} + \mathbf{C} \end{cases} \quad (17)$$

где \mathbf{H} – матрица (4). Выражая \mathbf{A} из первого уравнения и подставляя его во второе, получаем уравнение для вектора-столбца \mathbf{B} :

$$[(\hbar\Omega)^2 - \mathbf{H}^2]\mathbf{B} = i\hbar\Omega\mathbf{C}, \quad (18)$$

решение которого имеет вид:

$$\mathbf{B} = i\hbar\Omega [(\hbar\Omega)^2 - \mathbf{H}^2]^{-1}\mathbf{C}, \quad (19)$$

Входящая сюда обратная матрица может быть выражена через матрицы функции Грина в форме (1):

$$[(\hbar\Omega)^2 - \mathbf{H}^2]^{-1} = \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[\frac{1}{\hbar\Omega - \mathbf{H}} - \frac{1}{-\hbar\Omega - \mathbf{H}} \right] = \frac{1}{2\hbar\Omega} \left[\mathbf{G}(\hbar\Omega) - \mathbf{G}(-\hbar\Omega) \right] \quad (20)$$

Здесь возможность обращаться с матрицами, как с числовыми величинами, связана с тем, что все фигурирующие здесь матрицы имеют диагональный вид в представлении собственных векторов матрицы \mathbf{H} . Таким образом,

$$\mathbf{B} = \frac{i}{2} \left[\mathbf{G}(\hbar\Omega) - \mathbf{G}(-\hbar\Omega) \right] \mathbf{C} \quad (21)$$

Аналогично получается, что

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{2} \left[\mathbf{G}(\hbar\Omega) + \mathbf{G}(-\hbar\Omega) \right] \mathbf{C} \quad (22)$$

Теперь можно рассчитать поляризацию $\mathcal{P}_{\mathbf{r}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\mathbf{r}} &= 2\text{Re} \langle \Psi_0 | \hat{d}_{\mathbf{r}} | \Psi_s \sin \Omega t + \Psi_c \cos \Omega t \rangle = 2\text{Re} d[A_{\mathbf{r}} \sin \Omega t + B_{\mathbf{r}} \cos \Omega t] = \\ &= -d^2 [G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(\hbar\Omega) + G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(-\hbar\Omega)] \mathcal{E} \sin \Omega t \end{aligned} \quad (23)$$

Таким образом, в данном случае получается, что поляризация и возмущающее поле связаны вещественной восприимчивостью (обозначим ее $\chi_{\mathbf{r}\mathbf{R}}$), которая выражается через функцию Грина модели:

$$\chi_{\mathbf{r}\mathbf{R}} = -d^2 [G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(\hbar\Omega) + G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(-\hbar\Omega)]. \quad (24)$$

Вещественность полученной восприимчивости связана с отсутствием в рассматриваемой модели необратимых процессов. Если требуется получить связь возмущающего поля с дипольным моментом единицы объема решетки, то полученную восприимчивость (24) следует умножить на объемную плотность узлов решетки.

Обратим внимание на то, что, если недиагональные элементы $w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}$ в (4) отличны от нуля, то восприимчивость (24) имеет *нелокальный* характер – т.е. возмущение системы в некоторой точке приводит к появлению отклика не только в этой точке, но и, вообще говоря, во всех остальных. Указанное свойство соответствует наличию *пространственной дисперсии*, типичной для моделей с экситонным характером возбуждений.

0.2.2 Связь функции Грина со спектром поглощения

Рассмотрим случай, когда на все двухуровневые атомы рассматриваемой экситонной системы с гамильтонианом (4) действует *однородное* по всей решетке монохроматическое возмущение частоты Ω . Соответствующий оператор в этом случае отличается от (8) (сохраним для него тоже обозначение) и будет иметь вид:

$$V = V_0 \sin \Omega t, \quad V_0 = \mathcal{E} \sum_{\mathbf{r}} \hat{d}_{\mathbf{r}} \quad (25)$$

Пусть $|\lambda\rangle$ и E_λ – соответственно собственные функции и собственные значения гамильтониана \mathcal{H} рассматриваемой системы двухуровневых атомов. Тогда для оценки энергии

$\mathcal{A}(\Omega)$, поглощаемой в единицу времени такой системой, часто используют соотношение:

$$\mathcal{A}(\Omega) = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \frac{2\pi}{\hbar} \langle \Psi_0 | V_0 | \lambda \rangle \langle \lambda | V_0 | \Psi_0 \rangle \delta(\hbar\Omega - E_{\lambda}), \quad (26)$$

которое представляет собой произведение энергии E_{λ} , поглощаемой системой при переходе из основного состояния в состояние $|\lambda\rangle$, на вероятность этого перехода в единицу времени под действием возмущения V . Сумма берется по всем состояниям системы. Нулевая ширина спектральной линии, связанной с каждым переходом, есть следствие отсутствия необратимых процессов в рассматриваемой модели. Учет необратимых процессов может быть осуществлен введением конечной "ширины" δ в фигурирующие в (26) δ -функции. Это удобно сделать пользуясь формулой:

$$\delta(\hbar\Omega - E_{\lambda}) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} \frac{1}{\hbar\Omega + i\delta - E_{\lambda}} \quad (27)$$

в которой предельный переход осуществляется "не до конца", т.е. δ остается конечной⁶.

Функции $|\lambda\rangle$ всегда можно представить в виде линейной комбинации узельных функций (записать в узельном представлении):

$$|\lambda\rangle = \sum_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}}^{\lambda} |\mathbf{r}\rangle, \quad A_{\mathbf{r}}^{\lambda} = \langle \mathbf{r} | \lambda \rangle, \quad \sum_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}}^{\lambda} [A_{\mathbf{r}'}^{\lambda'}]^* = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (\text{унитарность}) \quad (28)$$

и обратно

$$|\mathbf{r}\rangle = \sum_{\lambda} B_{\mathbf{r}}^{\lambda} |\lambda\rangle, \quad B_{\mathbf{r}}^{\lambda} = \langle \lambda | \mathbf{r} \rangle, \quad \sum_{\lambda} B_{\mathbf{r}}^{\lambda} [B_{\mathbf{r}'}^{\lambda}]^* = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (\text{унитарность}) \quad (29)$$

откуда

$$A_{\mathbf{r}}^{\lambda} = [B_{\mathbf{r}}^{\lambda}]^* \quad (30)$$

Заметим, что E_{λ} в формуле (26) являются собственными числами матрицы (4), а величины $A_{\mathbf{r}}^{\lambda}$ в разложении (28) – компонентами соответствующих собственных векторов.

⁶Уширение линий поглощения экситонной системы может быть связано с взаимодействием экситонов с каким-либо другим полем, например, с фононами. При этом экситонная функция Грина заменяется экситонным пропагатором, в котором по фононным переменным произведено усреднение. Как уже было отмечено, экситонный пропагатор может отличаться от функции Грина свободного экситона перенормировкой закона дисперсии, которая иногда сопровождается появлением комплексно-значного энергетического сдвига с мнимой частью $i\delta$, чему и соответствует описанный переход $\hbar\Omega \rightarrow \hbar\Omega + i\delta$. Более подробное рассмотрение этой перенормировки выходит за рамки диссертационной работы. Подобный сдвиг, однако, может появиться при переходе к усредненной по беспорядку экситонной функции Грина в модели Ллойда. Этот случай будет рассмотрен в соответствующей части обзора.

Подставляя (27) и (28) в (26), получаем

$$\mathcal{A}(\Omega) = -\frac{1}{\pi} \frac{2\pi}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \frac{E_{\lambda}}{\hbar\Omega + i\delta - E_{\lambda}} A_{\mathbf{r}}^{\lambda} [A_{\mathbf{r}'}^{\lambda}]^* \langle \Psi_0 | V_0 | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r}' | V_0 | \Psi_0 \rangle \quad (31)$$

Поскольку оператор V_0 действует на все двухуровневые атомы одинаково и все они имеют одинаковый матричный элемент перехода (см. формулу (15) и текст при ней), то все фигурирующие в формуле (31) матричные элементы равны между собой: $\langle \Psi_0 | V_0 | \mathbf{r} \rangle = d\mathcal{E}$. Отсюда следует, что

$$\mathcal{A}(\Omega) = -\frac{2(d\mathcal{E})^2}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \frac{E_{\lambda}}{\hbar\Omega + i\delta - E_{\lambda}} A_{\mathbf{r}}^{\lambda} [A_{\mathbf{r}'}^{\lambda}]^* \quad (32)$$

Используя соотношение (30), получаем:

$$\mathcal{A}(\Omega) = -\frac{2(d\mathcal{E})^2}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} \sum_{\lambda} \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \left[\frac{\hbar\Omega + i\delta}{\hbar\Omega + i\delta - E_{\lambda}} - 1 \right] [B_{\mathbf{r}'}^{\lambda}]^* B_{\mathbf{r}}^{\lambda} \quad (33)$$

Единица в квадратных скобках не дает вклада – в силу условия унитарности (29) вклад, связанный с ней вещественен. Что касается оставшихся членов, то нетрудно убедиться в том, что они выражаются через матричные элементы функции Грина $\mathbf{G}(E) = [E - \mathbf{H}]^{-1}$ в узельном представлении. Поэтому окончательно получаем:

$$\mathcal{A}(\Omega) = -\frac{2(d\mathcal{E})^2}{\hbar} \lim_{\delta \rightarrow +0} \text{Im} (\hbar\Omega + i\delta) \sum_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(\hbar\Omega + i\delta) \quad (34)$$

Таким образом, спектр поглощения рассматриваемой модельной системы (понимаемый в смысле формулы (26)) также непосредственно выражается через функцию Грина матрицы (4)[25]. Формула (34) будет использована в оригинальной части диссертационной работы.

0.2.3 Связь функций Грина с временной динамикой возбуждения

Рассматриваемые в диссертации твердотельные модели, соответствующие гамильтониану (4), применяются также для описания переноса возбуждения (или частицы). При этом возникает следующая типичная задача. Допустим, что в момент времени $t = 0$ система приготовлена в узельном состоянии $|\mathbf{R}\rangle$ (т.е. атом в узле \mathbf{R} находится в возбужденном состоянии, а остальные – в основном). Требуется определить вероятность того, что атом в узле \mathbf{R} останется в возбужденном состоянии в произвольный момент времени $t > 0$.

Математически эта задача ставится следующим образом. Волновая функция системы при $t = 0$ в узельном представлении представляет собой вектор-столбец $\Psi(0)$ с компонентами $\Psi_{\mathbf{r}}(0) = \delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}}$. Перейдем к частотным единицам измерения энергии. Тогда динамика вектора-столбца волновой функции Ψ определяется уравнением Шредингера (матричным) $i\dot{\Psi} = \mathbf{H}\Psi$, где \mathbf{H} – матрица (4). Решение этого уравнения с указанными начальными условиями имеет вид:

$$\Psi(t) = \exp[i\mathbf{H}t] \Psi(0) \quad (35)$$

причем искомая вероятность равна квадрату модуля \mathbf{R} -ой компоненты волновой функции $|\Psi_{\mathbf{R}}(t)|^2$. Из (35) можно выразить $\Psi_{\mathbf{R}}(t)$ через собственные векторы (28) матрицы \mathbf{H} :

$$\Psi_{\mathbf{R}}(t) = [\exp(i\mathbf{H}t)]_{\mathbf{R}\mathbf{R}} = \sum_{\lambda} |A_{\mathbf{R}}^{\lambda}|^2 e^{iE_{\lambda}t} \quad (36)$$

Используя соотношения

$$e^{\pm iEt} = \pm \frac{1}{2\pi i} \lim_{V \rightarrow +0} \int \frac{e^{\pm iUt} dU}{U - E \mp iV}, \quad (37)$$

можно выразить интересующую нас вероятность через диагональные элементы функций Грина следующим образом:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{R}}(t)|^2 &= \sum_{\lambda\lambda'} |A_{\mathbf{R}}^{\lambda}|^2 e^{iE_{\lambda}t} |A_{\mathbf{R}}^{\lambda'}|^2 e^{-iE_{\lambda'}t} = \\ &= \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi^2} \int dU_1 dU_2 e^{i(U_1 - U_2)t} \sum_{\lambda\lambda'} \frac{|A_{\mathbf{R}}^{\lambda}|^2}{U_1 - E_{\lambda} - iV_1} \frac{|A_{\mathbf{R}}^{\lambda'}|^2}{U_2 - E_{\lambda'} + iV_2} = \\ &= \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi^2} \int dU_1 dU_2 e^{i(U_1 - U_2)t} G_{\mathbf{R}\mathbf{R}}(U_1 - iV_1) G_{\mathbf{R}\mathbf{R}}(U_2 + iV_2) \end{aligned} \quad (38)$$

В этой формуле фигурирует произведение двух функций Грина, отличающихся знаком мнимых частей энергетических аргументов. Такие функции называют, соответственно, запаздывающей и опережающей, поскольку одна из них употребляется при решении задачи для положительных времен, а другая – для отрицательных.

0.2.4 Теория возмущений для функции Грина. Уравнение Дайсона.

Заканчивая методическую часть обзора, приведем элементарные сведения, касающиеся теории возмущений для функций Грина, которые понадобятся нам в дальнейшем. Допу-

стим матрица (4), которой мы занимаемся, допускает разбиение на основную \mathbf{H}_0 (функция Грина \mathbf{G}_0 которой известна) и возмущающую \mathbf{V} .

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V} \quad (39)$$

Получим уравнение, связывающее полную функцию Грина $\mathbf{G} = [E - \mathbf{H}]^{-1}$ с невозмущенной \mathbf{G}_0 . Очевидно

$$\mathbf{G}^{-1} = E - \mathbf{H}_0 - \mathbf{V} = (E - \mathbf{H}_0)(1 - [E - \mathbf{H}_0]^{-1}\mathbf{V}) = (E - \mathbf{H}_0)(1 - \mathbf{G}_0\mathbf{V}) \quad (40)$$

Обращая левую и правую части этого соотношения, получаем что

$$\mathbf{G} = (1 - \mathbf{G}_0\mathbf{V})^{-1}\mathbf{G}_0. \quad (41)$$

Умножая теперь обе части части (41) слева на $(1 - \mathbf{G}_0\mathbf{V})$, приходим к следующему уравнению, связывающему \mathbf{G} и \mathbf{G}_0 :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G} \quad (42)$$

Это уравнение обычно называют уравнением Дайсона[3, 19]. Иттерируя это уравнение, можно получить для \mathbf{G} следующее разложение по степеням \mathbf{V} :

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0\mathbf{V}\mathbf{G}_0 + \dots \quad (43)$$

Прямая подстановка показывает, что ряд (43) является решением уравнения Дайсона (42). Разложение (43) служит основой для многих схем вычисления усредненных по беспорядку функций Грина и будет использовано нами в следующем разделе для получения точного решения модели Ллойда.

0.2.5 Точнорешаемая модель Ллойда

Количество точных решений в теории твердотельных *неупорядоченных* моделей, связанных с матрицами (4), чрезвычайно мало и важнейшими среди них (на наш взгляд) являются решения, полученные Дайсоном[24] и Ллойдом[16]. Разделы данной диссертационной работы, посвященные одномерным неупорядоченным моделям, базируются, главным образом, на предложенной Дайсоном схеме анализа матриц типа (4). Тем не менее, в

настоящем обзоре представляется уместным привести также и точное решение, полученное Ллойдом, поскольку оно чрезвычайно наглядно демонстрирует самоценность метода функций Грина для изучения случайных матриц типа (4). Решение Ллойда, к тому же, выявляет важную роль конкретного вида статистики узельных энергий $\varepsilon_{\mathbf{r}}$, показывая, что при некотором специальном ее виде, неупорядоченная модель сводится (строго) к трансляционно-симметричной. Мы приводим здесь модель Ллойда также и для того, чтобы проследить ее связь с моделью Дайсона, которая (связь), насколько известно автору, не освещалась в литературе. Дайсон, рассматривая одномерную неупорядоченную модель с гамильтонианом типа (4) при взаимодействии только ближайших соседей, получил замкнутое интегральное уравнение для статистики краевой функции Грина и указал семейство *недиагонально* разупорядоченных моделей, для которых это уравнение может быть решено в явном виде. Ниже мы покажем, что в случае, соответствующем модели Ллойда, уравнение Дайсона для статистики функции Грина может быть точно решено в случае *диагонально* неупорядоченной матрицы (4).

Перейдем к формулировке модели Ллойда. В этой модели диагональные элементы $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ матрицы (4) (узельные энергии) считаются случайными величинами, имеющими функцию распределения $P(\varepsilon)$ в виде лорентциана (статистика Коши):

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + \varepsilon^2} \quad (44)$$

Нулевое значение средней узельной энергий никак не ограничивает рассмотрения, поскольку конечное значение этой энергии всегда может быть получено соответствующим смещением энергетического аргумента функций Грина. Считая диагональную часть матрицы (4) невозмущенным гамильтонианом \mathbf{H}_0 , а недиагональную – возмущением \mathbf{V} напишем для полной функции Грина ряд Дайсона (43), в котором матричные элементы невозмущенной функции Грина \mathbf{G}_0 и возмущения \mathbf{V} в узельном представлении будут иметь соответственно вид:

$$[G_0(E)]_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \frac{\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}}, \quad V_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \quad (45)$$

$$G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(E) = \frac{\delta_{\mathbf{r}\mathbf{R}}}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} + \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} w_{\mathbf{r}-\mathbf{R}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{R}}} + \sum_{\mathbf{r}'} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}'}} w_{\mathbf{r}'-\mathbf{R}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{R}}} + \dots \quad (46)$$

В случае отсутствия беспорядка все величины $\varepsilon_{\mathbf{r}} = \varepsilon = const$ и написанный ряд дает выражение для функции Грина упорядоченной системы. Если обозначить через $\mathbf{g}(E)$ эту функцию при $\varepsilon_{\mathbf{r}} = 0$, то очевидно, что:

$$g_{\mathbf{r}\mathbf{R}}(E - \varepsilon) = \frac{\delta_{\mathbf{r}\mathbf{R}}}{E - \varepsilon} + \left(\frac{1}{E - \varepsilon}\right)^2 w_{\mathbf{r}-\mathbf{R}} + \left(\frac{1}{E - \varepsilon}\right)^3 \sum_{\mathbf{r}'} w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} w_{\mathbf{r}'-\mathbf{R}} + \dots \quad (47)$$

Для вычисления усредненной функции Грина неупорядоченной системы необходимо усреднить каждый член ряда (46) по узельным энергиям. Рассмотрим, например, члены $\sim V^2$ в формуле (46), среднее значение которых зависит от взаимоотношения фигурирующих в них индексов следующим образом:

$$\left\langle \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}'}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{R}}} \right\rangle = \begin{cases} \left[\int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{E - \varepsilon} \right]^3 & \text{все индексы } \mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{R} \text{ различны} \\ \int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)^3} & \text{все индексы } \mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{R} \text{ одинаковы} \\ \int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)^2} \int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{E - \varepsilon} & \text{среди } \mathbf{r}, \mathbf{r}', \mathbf{R} \text{ есть два совпадающих} \end{cases} \quad (48)$$

Мы здесь опустили неподлежащие усреднению множители $w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} w_{\mathbf{r}'-\mathbf{R}}$. Как было показано в предыдущих разделах, в приложениях, как правило, используются функции Грина при значениях энергии, имеющей малую положительную мнимую часть, т.е. $E \rightarrow E + i\delta$, $\delta \rightarrow +0$. Имея это ввиду, рассмотрим теперь общий вид интегралов, возникающих при усреднение членов ряда (46). Эти интегралы имеют следующий вид (см., например, (48)):

$$\left\langle \left(\frac{1}{E + i\delta - \varepsilon} \right)^n \right\rangle = \int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{(E + i\delta - \varepsilon)^n}, \quad (49)$$

где n – целое число. Подставим сюда $P(\varepsilon)$ в виде (44) и найдем значение интеграла по вычетам. Особенности подынтегральной функции располагаются в точках $\pm i\Delta$ и $E + i\delta$. Если замыкание контура производится по нижнему большому полукругу, то в контур интегрирования попадает только полюс при $\varepsilon = -i\Delta$. Вычисляя соответствующий вычет, получаем:

$$\int \frac{d\varepsilon P(\varepsilon)}{(E + i\delta - \varepsilon)^n} = \frac{\Delta}{\pi} \int \frac{d\varepsilon}{(\Delta^2 + \varepsilon^2)} \frac{d\varepsilon}{(E + i\delta - \varepsilon)^n} = \left(\frac{1}{E + i[\Delta + \delta]} \right)^n \quad (50)$$

Отсюда следует, что в случае статистики Коши, все три средних в (48) равны $(E + i[\Delta + \delta])^{-3}$ и *не зависят* от взаимоотношения индексов \mathbf{r}, \mathbf{r}' и \mathbf{R} , что позволяет при усреднении членов ряда (46) $\sim V^2$ вынести указанные средние за знак суммы. После этого эти члены приобретают вид соответствующих членов разложения (47) функции Грина упорядоченной модели при замене $\varepsilon \rightarrow -i\Delta$ (стремящуюся к нулю величину $i\delta$ здесь уже можно

опустить). Ясно, что аналогичное рассуждение справедливо в отношении членов ряда (46) произвольного порядка и мы приходим к заключению, что усредненная по узельным энергиям функция Грина неупорядоченной системы со статистикой диагонального беспорядка типа Коши с параметром Δ равна функции Грина трансляционно-симметричной системы, взятой от комплексной энергии $E + i\Delta$:

$$\langle G_{\mathbf{rR}}(E + i\delta) \rangle \Big|_{\delta \rightarrow +0} = g_{\mathbf{rR}}(E + i\Delta) \quad (51)$$

Явный вид функции Грина \mathbf{g} можно написать, пользуясь тем, что в случае трансляционно-симметричной системы, собственные функции и значения матрицы (4) могут быть найдены по формулам (5):

$$g_{\mathbf{rR}}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{e^{i(\mathbf{r}-\mathbf{R})\mathbf{q}}}{E - J_{\mathbf{q}}}, \quad J_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{r}} w_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (52)$$

Как видно, для получения выражения (51) узловым является соотношение (50), справедливое только для статистики Коши и позволяющее преодолеть трудности, связанные с чрезвычайно запутанным характером усреднения различных членов разложения (46), возникающим из-за зависимости результата усреднения от взаимоотношения индексов, имеющей место в общем случае.

0.2.6 Графическое изображение членов разложения функции Грина

Прежде чем переходить к изложению результатов Дайсона, необходимых для понимания оригинальных разделов диссертационной работы, посвященных неупорядоченным моделям, представляется разумным ввести простейший диаграммный язык, существенно упрощающий вывод целого ряда формул. Поместить этот материал в обзорной части диссертации уместно также и потому, что подобные языки[26] часто применяются для классификации членов разложений функций Грина. И, наконец, указанный язык используется в главе 9 диссертационной работы, в которой на его основе вводится понятие следящих операторов.

Рассмотрим разложение функции Грина (46), в котором каждому множителю $w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}$ сопоставим стрелку, направленную из узла решетки \mathbf{r} в узел \mathbf{r}' . Каждому множителю

Рис. 1: Примеры диаграмм

$1/(E - \varepsilon_{\mathbf{r}})$ сопоставим точку, относящуюся к узлу решетки \mathbf{r} . Тогда каждому члену разложения (46) матричного элемента $G_{\mathbf{r}\mathbf{R}}$ функции Грина будет соответствовать некоторая траектория (диаграмма), соединяющая узлы \mathbf{r} и \mathbf{R} рассматриваемой решетки двухуровневых атомов, состоящая из стрелок, каждая из которых начинается и заканчивается точками. Смысл описанного сопоставления ясен из рис.1, на котором приведены соответствующие примеры. На этом языке формула (46) записывается следующим образом:

$$G_{\mathbf{r}\mathbf{R}} = \text{Сумма всех диаграмм, соединяющих узлы } \mathbf{r} \text{ и } \mathbf{R} \quad (53)$$

Такой язык иногда оказывается удобным для классификации членов разложения – примеры будут рассмотрены при изложении результатов Дайсона в следующем разделе.

Заметим здесь, что диаграммный язык оказывается удобным еще и тем, что правила сопоставления можно менять в процессе рассуждений. Например, для усредненной функции Грина можно написать следующее, аналогичное (53), формальное выражение:

$$\langle G_{\mathbf{r}\mathbf{R}} \rangle = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, соединяющих узлы } \mathbf{r} \text{ и } \mathbf{R}, \text{ причем каждому} \\ \text{узлу решетки, через который проходит диаграмма, сопоставляется} \\ \int d\varepsilon P(\varepsilon)/[E - \varepsilon]^m, \quad \text{где } m \text{ – число точек в узле} \end{cases} \quad (54)$$

Понятно, что здесь уже каждой точке траектории сопоставляется единица – ведь по узловым энергиям $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ выполнено усреднение.

0.2.7 Метод Дайсона

Если рассмотренная выше модель Ллойда нечувствительна к размерности пространства и виду взаимодействия $w_{\mathbf{r}}$, то в модели Дайсона, о которой сейчас пойдет речь, рассматривается *одномерная* решетка узлов с взаимодействием только между ближайшими соседями. Матрица (4) в этом случае имеет вид:

$$H_{rr'} = \delta_{r,r'}\varepsilon_r + w[\delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}] \quad (55)$$

где r – целочисленный номер узла решетки. Заметим сразу, что Дайсон в своей работе [24] рассматривал матрицы более общего вида с флуктуирующими недиагональными элементами и именно для случая *недиагонально* неупорядоченной модельной системы он сумел получить точное выражение для статистики функции Грина и плотность состояний. В нашей диссертационной работе изучаются главным образом диагонально неупорядоченные модели, поэтому мы ограничим наше рассмотрение матрицами вида (55), для которых Дайсону не удалось получить окончательных ответов. Тем не менее, метод анализа матриц типа (55), предложенный Дайсоном, и ряд полученных им промежуточных результатов, использованные нами в оригинальной части диссертационной работы, будут сейчас подробно изложены.

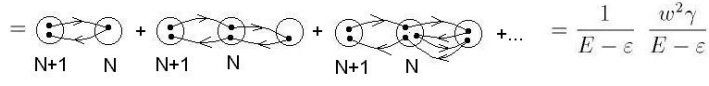
Пусть одномерная решетка двухуровневых атомов, на которой определена матрица (55), конечна (но достаточно большая) и пусть N – номер левого крайнего узла этой решетки. Обозначим через γ соответствующий краевой диагональный элемент функции Грина: $\gamma \equiv G_{NN}$. Будем говорить об этом элементе как о *краевой функции Грина* (КФГ). Добавим к решетке слева еще один узел с атомом, расщепление уровней которого обозначим через ε и поставим вопрос о том, как краевая функция Грина $\tilde{\gamma} \equiv G_{N+1,N+1}$ увеличенной решетки выражается через γ .

Для ответа на этот вопрос используем диаграммное представление функций Грина, в соответствии с которым

$$\tilde{\gamma} = \frac{1}{E - \varepsilon} + \sum \left[\text{всевозможных петель, начинающихся и заканчивающихся на узле } N + 1 \right] \quad (56)$$

Фигурирующие здесь петли можно классифицировать по числу точек в узле $N + 1$. Рассмотрим, например, всевозможные петли, имеющие две точки в узле $N + 1$. Эти две точки дадут множитель $1/(E - \varepsilon)^2$ в соответствующих выражениях. Кроме того, петли такого вида всегда имеют одну исходящую из узла $N + 1$ стрелку и одну входящую в него, причем поскольку матрица (55) соответствует взаимодействию только ближайших соседей, обе эти стрелки обязательно попадают в узел N решетки (Рис.20). Этим двум стрелкам соответствует множитель w^2 .

Сумма всевозможных диаграмм, которые связывают концы этих стрелок на узле N и распространяются на решетку справа от узла N равна КФГ γ . Таким образом, мы можем

$$\sum \left[\text{все возможных петель, имеющих две точки на узле } N+1 \right] =$$


$$= \frac{1}{E-\varepsilon} \frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon}$$

Рис. 2: Суммирование диаграмм типа петель

сказать, что

$$\sum \left[\text{все возможных петель, имеющих две точки на узле } N+1 \right] = \frac{1}{E-\varepsilon} \frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon} \quad (57)$$

Аналогично можно показать, что

$$\sum \left[\text{все возможных петель, имеющих три точки на узле } N+1 \right] = \frac{1}{E-\varepsilon} \left(\frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon} \right)^2 \quad (58)$$

и далее

$$\sum \left[\text{все возможных петель, имеющих } n \text{ точек на узле } N+1 \right] = \frac{1}{E-\varepsilon} \left(\frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon} \right)^{n-1} \quad (59)$$

Поскольку приведенная классификация охватывает все возможные типы диаграмм, то мы приходим к выводу, что

$$\tilde{\gamma} = \frac{1}{E-\varepsilon} \left[1 + \frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon} + \left(\frac{w^2\gamma}{E-\varepsilon} \right)^2 + \dots \right] = \frac{1}{E-\varepsilon - w^2\gamma} \quad (60)$$

Это соотношение является узловым в методе Дайсона. Покажем как с его помощью можно получить уравнение для статистики КФГ диагонально неупорядоченной модели, соответствующей случайной матрице (55).

КФГ γ зависит от случайных узельных энергий $\varepsilon_r, r \leq N$ и поэтому сама является случайной. Обозначим ее функцию распределения через $\sigma(x)$. Обозначим через $\tilde{\sigma}(x)$ аналогичную функцию распределения для КФГ увеличенной решетки $\tilde{\gamma}$. Пользуясь соотношением (60) можно связать эти две функции распределения следующим образом:

$$\tilde{\sigma}(x) = \int dy d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma(y) \delta \left(x - \frac{1}{E-\varepsilon-w^2y} \right) = \frac{1}{x^2} \int dy \sigma(y) P(E-1/x-w^2y) \quad (61)$$

Здесь $P(\varepsilon)$ – функция распределения узельных энергий (одинаковая для всех узлов), употребленная в уравнении (61) для усреднения по энергиям узла $N+1$. При больших длинах

решетки, статистики КФГ в исходной решетке γ и в увеличенной $\tilde{\gamma}$ будут приближаться друг к другу и в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ должно быть $\tilde{\sigma}(x) = \sigma(x)$. Таким образом, для стационарной функции распределения КФГ получаем следующее замкнутое интегральное уравнение:

$$x^2\sigma(x) = \int dy\sigma(y)P(E - 1/x - w^2y) \quad (62)$$

Немедленно возникает вопрос о возможности использования уравнения (62) при комплексных значениях энергии E . Если энергетический спектр матрицы (55) ограничен, то при вещественных значениях E , не попадающих в область спектра, КФГ $\gamma(E)$ сама вещественна и ее среднее значение может быть вычислено при помощи функции $\sigma(x)$, найденной из уравнения (62)

$$\langle \gamma(E) \rangle = \int \sigma(x)xdx, \quad (63)$$

и затем аналитически продолжено на область спектра. Однако, если границ спектра указать нельзя (а это всегда так, если функция распределения узельных энергий $P(\varepsilon)$ допускает возможность появления произвольных энергий ε_r), то непосредственное применение уравнения (62) становится невозможным и метод Дайсона требует дальнейшего развития. Заметим, что такая трудность возникает, например, при попытке проанализировать методом Дайсона описанную выше модель Ллойда.

Следующий раздел будет посвящен преодолению этой трудности, причем будет показано, что, если функция распределения узельных энергий имеет вид распределения Коши, то уравнение (62) может быть решено точно и задача Ллойда для одномерной модели с взаимодействием только ближайших соседей может быть решена также методом Дайсона. Отметим, что несмотря на компактность уравнения (62), автору не известны публикации, в которых было бы получено какое-либо точное его решение.⁷ Приведенное в оригинальной части диссертационной работы (заключительные разделы третьей главы) исследование этого уравнения показало, характер его решения чрезвычайно сильно зависит от вида функции $P(\varepsilon)$ и меняется от бесконечно дифференцируемой функции Лоренца (для модели Ллойда) до имеющей бесконечное количество разрывов функции фрактального вида в случае бинарно неупорядоченной модели.

⁷Напомним еще раз, что Дайсон в своей работе, где он предложил описываемую методику, получил точное решение, соответствующее *недиагонально* неупорядоченной модели.

0.2.8 Метод Дайсона для случая комплексных энергий

Рекуррентное соотношение (60)

$$\tilde{\gamma} = \frac{1}{\Omega - \varepsilon - w^2\gamma}, \quad (64)$$

разумеется, имеет место и при произвольных комплексных значениях энергетического аргумента $\Omega = U + iV$, в том числе и тогда, когда вещественная часть этого аргумента U попадает в спектр гамильтониана (55). В случае комплексного Ω краевая функция Грина γ будет комплексной случайной величиной, характеризующейся функцией распределения $\rho(x, y)$, причем $\rho(x, y)dxdy$ дает вероятность того, что вещественная и мнимая части γ попадут соответственно в интервалы $[x, x + dx]$ и $[y, y + dy]$. Если $\tilde{\rho}(x, y)$ аналогичная функция, описывающая КФГ увеличенной решетки, то для ρ и $\tilde{\rho}$ можно написать соотношение аналогичное (61):

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x, y) = & \int \delta\left(x - \operatorname{Re}\left\{\frac{1}{\Omega - \varepsilon - w^2(\alpha + i\beta)}\right\}\right) \times \\ & \times \delta\left(y - \operatorname{Im}\left\{\frac{1}{\Omega - \varepsilon - w^2(\alpha + i\beta)}\right\}\right) P(\varepsilon)\rho(\alpha, \beta)d\alpha d\beta d\varepsilon \end{aligned} \quad (65)$$

Вычисление интегралов с δ -функциями и переход $N \rightarrow \infty$ приводит к следующему уравнению для стационарной функции ρ :

$$w^4(x^2 + y^2)^2\rho(x, y) = \int \rho\left(\frac{U - \varepsilon}{w^2} - \frac{1}{w^2} \frac{x}{x^2 + y^2}, \frac{V}{w^2} + \frac{1}{w^2} \frac{y}{x^2 + y^2}\right) P(\varepsilon)d\varepsilon \quad (66)$$

Для сокращения записи положим $w = 1$, что соответствует тому, что энергетические величины и функции Грина измеряются, соответственно, в единицах w и $1/w$. Тогда уравнение (66) будет иметь вид:

$$(x^2 + y^2)^2\rho(x, y) = \int \rho\left(U - \varepsilon - \frac{x}{x^2 + y^2}, V + \frac{y}{x^2 + y^2}\right) P(\varepsilon)d\varepsilon \quad (67)$$

Можно рассматривать ρ как функцию комплексной переменной $z = x + iy$. Тогда

$$\frac{1}{z} = \frac{x - iy}{x^2 + y^2}$$

и уравнение (67) можно записать в компактном виде:

$$|z|^4\rho(z) = \int \rho\left(\Omega - \varepsilon - \frac{1}{z}\right) P(\varepsilon)d\varepsilon \quad (68)$$

Заметим, что ρ , к сожалению, вообще говоря, не является голоморфной функцией комплексной переменной z , не удовлетворяет условиям Коши-Римана и т.д.

Теперь воспользуемся тем, что в приложениях мнимая часть энергетического аргумента обычно считается исчезающей малой $V \rightarrow 0$. Заметим, что если $V = 0$, то непосредственная подстановка показывает, что решение (67) можно представить в виде

$$\rho_{U,V=0}(x, y) \equiv \rho_0(x, y) = \sigma_U(x)\delta(y), \quad (69)$$

где функция $\sigma_U(x)$ удовлетворяет уравнению (62)⁸ при $E = U$

$$\begin{aligned} x^2 \sigma_U(x) &= \int \sigma_U(U - \varepsilon - 1/x) P(\varepsilon) d\varepsilon \\ x^2 \sigma_U(x) &= \int \sigma_U(\varepsilon) P(U - \varepsilon - 1/x) d\varepsilon \\ \int \sigma_U(x) dx &= 1, \end{aligned} \quad (70)$$

причем в этом уравнении энергия U уже может быть *любым вещественным числом*. Если $V \neq 0$, но исчезающе мала, то функцию $\rho_{U,V \rightarrow 0}(x, y)$ можно вычислить с помощью *одной итерации* (67) следующим образом:

$$\rho_{U,V \rightarrow 0}(x, y) = \left(\frac{1}{x^2 + y^2} \right)^2 \int \rho_0 \left(U - \varepsilon - \frac{x}{x^2 + y^2}, V + \frac{y}{x^2 + y^2} \right) P(\varepsilon) d\varepsilon \quad (71)$$

Сосчитаем при помощи (71) мнимую часть усредненной КФГ

$$\langle \text{Im} \gamma \rangle = \int \rho(x, y) y dx dy \quad (72)$$

при $V \rightarrow 0$. Для этого подставим (71) в (72). Делая замену переменных

$$\begin{aligned} -\frac{x}{x^2 + y^2} &\rightarrow x \\ \frac{y}{x^2 + y^2} &\rightarrow y, \end{aligned} \quad (73)$$

определяя якобиан преобразования (73) и учитывая (69), получаем для усредненной мнимой части КФГ выражение:

$$\langle \text{Im} \gamma \rangle = \lim_{V \rightarrow +0} \int d\varepsilon dx dy \frac{P(\varepsilon) y}{x^2 + y^2} \sigma_U(U - \varepsilon + x) \delta(V + y) = \quad (74)$$

⁸Ниже мы приводим две эквивалентных формы этого уравнения

$$-\lim_{V \rightarrow +0} \int d\varepsilon dx \frac{P(\varepsilon) V}{x^2 + V^2} \sigma_U(U - \varepsilon + x) = -\pi \int d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma_U(U - \varepsilon)$$

Используя (70), это выражение можно переписать в следующем виде:

$$\langle \text{Im}\gamma(U, V \rightarrow 0) \rangle = -\pi \int d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma_U(U - \varepsilon) = -\pi \lim_{x \rightarrow \infty} x^2 \sigma_U(x) \quad (75)$$

Таким образом, для вычисления мнимой части усредненной КФГ следует решить уравнение (70) для всех вещественных энергий (в том числе и для таких, которые попадают в спектр матрицы гамильтониана (55)), после чего мнимую часть КФГ рассчитать по формуле (75). Поскольку при энергиях U , непопадающих в спектр гамильтониана, $\langle \text{Im}\gamma(U, V \rightarrow 0) \rangle = 0$, то, понятно, что при этих энергиях перекрытие функций распределения плотности вероятностей КФГ $\sigma(\gamma)$ и смещенной функции распределения узельных энергий $P(\gamma - U)$ равно нулю (напомним, что здесь всюду мы имеем дело с энергиями и функциями Грина, обезразмеренными на энергию междузельного взаимодействия w , которую мы положили равной единице).

Выполним теперь следующую программу:

покажем, что для модели Ллойда уравнение (70) (или (62)) решается точно,

для этого точного решения получим усредненную мнимую часть КФГ,

убедимся в том, что полученный результат совпадает с точным решением Ллойда и проверим тем самым все сделанные выше утверждения и формулы.

Введем следующие обозначения для фигурирующих в модели Ллойда лоренцовских функций:

$$\frac{1}{\pi} \frac{\delta}{\delta^2 + (x - a)^2} \equiv L_{a,\delta}(x) \quad (76)$$

Как известно, свертка двух лоренцовских функций есть тоже лоренцовская функция, поэтому:

$$\int L_{a,\delta}(x) L_{b,\Delta}(x) dx = L_{a-b,\delta+\Delta}(0) \quad (77)$$

Лоренцовской функции можно сопоставить комплексное число θ , принадлежащее верхней полуплоскости комплексного переменного, следующим образом:

$$L_{a,\delta}(x) \equiv L_{\theta}(x), \quad \text{где} \quad \theta \equiv a + i\delta \quad \delta > 0 \quad (78)$$

Будем называть это число *показателем лоренцовской функции*. Тогда, если обозначить $\xi \equiv b + i\Delta$, то (77) можно записать так:

$$\int L_\theta(x)L_\xi(x)dx = L_z(0) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{z}, \quad z = \theta - \bar{\xi} \quad (79)$$

$$\int L_w(x-t)L_u(t)dt = L_{w-\bar{u}}(x)$$

Для рассматриваемого случая модели Ллойда функция $P(\varepsilon)$ имеет вид лоренциана (44) и уравнение (70) можно записать так:

$$\sigma_U(x) = \frac{1}{x^2} \int L_{U-1/x,\Delta}(x')\sigma_U(x')dx' \quad (80)$$

Будем искать решение $\sigma_U(x)$ тоже в виде лоренцовской функции:

$$\sigma_U(x) = L_{a,\delta}(x) = L_\theta(x), \quad \theta = a + i\delta \quad (81)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению показателя θ . Если обозначить

$$\eta = U - 1/x + i\Delta, \quad (82)$$

то

$$\int L_{U-1/x,\Delta}(x')\sigma_U(x')dx' = \int L_\eta(x')L_\theta(x')dx' = L_z(0) \quad (83)$$

причем

$$z = \eta - \bar{\theta} \quad (84)$$

Очевидно:

$$L_z(0) = L_w(1/x), \quad \text{где} \quad w = z + 1/x \quad (85)$$

Теперь воспользуемся алгебраическим тождеством, которое можно проверить:

$$\frac{1}{x^2} L_w(1/x) = L_{1/\bar{w}}(x) \quad (86)$$

левая часть которого, в соответствии с (83) и (85), совпадает с правой частью (80). Тогда из (80), (85) и (86) следует, что

$$\theta = \frac{1}{\bar{w}} = \frac{1}{U - i\Delta - \theta}. \quad (87)$$

Из этого квадратного уравнения находим θ . Сосчитаем мнимую часть КФГ по формуле (75), которая для модели Ллойда выглядит так:

$$\langle \operatorname{Im}\gamma \rangle = -\pi \int L_{U+i\Delta}(x)L_\theta(x)dx = -\pi L_{U+i\Delta-\bar{\theta}}(0) = \quad (88)$$

$$-\pi L_{1/\bar{\theta}}(0) = -\frac{1}{2} \operatorname{Im} \left(U + i\Delta - \sqrt{(U + i\Delta)^2 - 4} \right)$$

Последняя формула совпадает с описанным в предыдущих разделах результатом Ллойда, согласно которому в рассматриваемом случае усредненную функцию Грина разупорядоченной системы можно получить из упорядоченной⁹ добавив к энергии мнимую часть, равную полуширине лоренцевской функции распределения узельной энергии.

⁹Упорядоченную КФГ (т.е. при всех $\varepsilon_r = 0$) полубесконечной решетки можно найти из уравнения $\gamma = 1/(U - \gamma)$, которое следует из формулы (60) при $w = 1$, $N \rightarrow \infty$ и $\varepsilon_r = 0$

0.3 ПРОСТРАНСТВЕННО ОГРАНИЧЕННЫЕ МОДЕЛИ. МЕТОД ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ.

В этой главе приводятся оригинальные исследования автора, относящиеся к простейшим трансляционно несимметричным моделям – моделям ограниченных систем. Эти системы обычно представляют собой конечный фрагмент трансляционно симметричной решетки и соответствующая таким системам модельная матрица (4) имеет диагональные элементы в форме (6).

Первые разделы настоящей главы посвящены разработке метода расчета спектра поглощения пространственно ограниченных систем. Отправным пунктом в этих случаях является формула (34). Для фигурирующей в ней функции Грина получается дифференциальное уравнение, которое в ряде простых (но не тривиальных с точки зрения анализа соответствующей матрицы (4)) случаев может быть решено точно. Результаты, полученные в этих разделах, проверялись прямым компьютерным экспериментом, обнаруживая полное согласие. Заметим, что рассмотренные задачи о спектрах одномерной конечной цепочки и сферическом кластере, возможно, могут быть применены для интерпретации спектров реальных систем типа J -агрегатов [77, 78, 79] и квантовых точек, причем в последнем случае расчеты по полученным формулам могут быть проделаны и тогда, когда компьютерное моделирование уже становится невозможным.

В следующих разделах развитый подход, основанный на дифференциальном уравнении для функции Грина, применяется для расчета восприимчивости слоистых систем и нахождения их спектров отражения и пропускания в области экситонного поглощения, при наличии добавочных волн Пекара. В предложенной схеме расчета отсутствуют известные затруднения, связанные с необходимостью дополнительных условий для определения амплитуд добавочных волн.

В заключительном разделе с помощью развитой методики расчета восприимчивости ограниченных систем анализируется предложенный автором эффект антизеркального отражения от кристаллической квазидвумерной полосы (квантовой ямы) с экситонным ха-

рактором возбуждений.

0.3.1 Метод вычисления спектра поглощения пространственно ограниченных решеток.

Для функции Грина $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = (E - \mathbf{H})_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}^{-1}$, построенной по матрице \mathbf{H} (4) определим следующую вспомогательную функцию $g(\mathbf{r}, E)$:

$$g(\mathbf{r}, E) = \sum_{\mathbf{l}} G_{\mathbf{r}\mathbf{l}} \quad (89)$$

Если спектр сосредоточен в частотной области, размеры которой значительно меньше его средней частоты (как это обычно и бывает), то слабую функцию $\hbar\Omega + i\delta \equiv E + i\delta$ в (34) можно считать в области спектра вещественной и постоянной и написать для спектра поглощения модельной системы с гамильтонианом \mathbf{H} следующую формулу:

$$A(E) = \frac{2E(d\mathcal{E})^2}{\hbar} a(E), \quad \text{где} \quad a(E) \equiv -\text{Im} \sum_{\mathbf{r}} g(\mathbf{r}, E + i\delta) \quad (90)$$

при этом каждой каждой линии спектра соответствует лоренциан с полушириной δ . При указанном сосредоточенном характере спектра, его вид определяется функцией $a(E)$, на вычисление которой мы и направим усилия. Считая диагональную часть матрицы (4) основной (\mathbf{H}_0), а недиагональную возмущением (\mathbf{V}), запишем для функции Грина \mathbf{G} уравнение Дайсона (42):

$$G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \frac{\delta_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} + \sum_{\mathbf{l}} \frac{w_{\mathbf{r}-\mathbf{l}}}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} G_{\mathbf{l}\mathbf{r}'} \quad (91)$$

Суммируя по \mathbf{r}' , получим уравнение для функции g (89), в котором перейдем от суммирования по \mathbf{l} к интегрированию (в связи с этим ниже мы немного изменяем обозначения: $w_{\mathbf{r}} \rightarrow w(\mathbf{r})$)

$$g(\mathbf{r})[E - \varepsilon_{\mathbf{r}}] = 1 + \rho \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (92)$$

здесь ρ – плотность решетки.

Переход от суммирования к интегрированию в (92) является единственным приближением, которое мы делаем, и следует указать, когда такой переход допустим. Сумма по \mathbf{l} в уравнении Дайсона близка к интегралу в (92), если функция $w(\mathbf{r} - \mathbf{r}')g(\mathbf{r}')$ не слишком сильно меняется при изменении \mathbf{r}' на постоянную решетки b . Поэтому, если R характерный радиус взаимодействия $w(\mathbf{r})$, то, во-первых, требуется, чтобы $R > b$. Во-вторых, $g(\mathbf{r})$

также не должна сильно меняться на масштабах $\sim b$, в чем необходимо убедиться по окончании расчета по предлагаемой ниже схеме. Забегая вперед, отметим, что в области спектра поглощения g осциллирует с пространственной частотой резонансного экситона. Основной вклад в спектр поглощения (сумму (90)) дают длинноволновые экситоны (быстрые осцилляции коротковолновых экситонов эффективно усредняются при суммировании), поэтому указанный переход от суммы к интегралу в данном случае совершенно оправдан. Подчеркнем, что g определяет спектр поглощения, а не плотность состояний, при расчете которой коротковолновые экситоны также играют роль.

Определим теперь функцию Ψ (не путать с волновой функцией!) следующим соотношением:

$$\Psi(\mathbf{r}) \equiv g(\mathbf{r})[E - \varepsilon(\mathbf{r})] \quad (93)$$

Тогда из выражения (92) следует, что

$$\Psi(\mathbf{r}) = \rho \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[\lambda^2 + \frac{\Psi(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon(\mathbf{r}')} \right] d\mathbf{r}', \quad (94)$$

где

$$\lambda^{-2} \equiv \rho \int w(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (95)$$

Интегральное уравнение (94) может быть сведено к дифференциальному следующим образом. Для широкого класса функций $w(\mathbf{r})$ можно построить дифференциальный оператор $L(\partial/\partial\mathbf{r})$ такой, что $w(\mathbf{r})$ будет для него *функцией источника* (функцией Грина), т.е.

$$L(\partial/\partial\mathbf{r})w(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (96)$$

Для этого следует записать уравнение (96) в представлении Фурье

$$w(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \tilde{w}(\mathbf{k}) d\mathbf{k} \quad L(i\mathbf{k}) \tilde{w}(\mathbf{k}) = 1 \quad (97)$$

Из последнего (алгебраического) уравнения определяется вид функции L .

Рассмотрим теперь неоднородное уравнение

$$L(\partial/\partial\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (98)$$

Частное решение этого уравнения можно получить с помощью функции источника $w(\mathbf{r})$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (99)$$

Если $\Phi(\mathbf{r}) = \rho[\lambda^2 + \Psi(\mathbf{r})/(E - \varepsilon(\mathbf{r}))]$, то выражение (99) совпадает с (94). Поэтому интересующее нас решение $\Psi(\mathbf{r})$ интегрального уравнения (94) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$L(\partial/\partial\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = \rho\left[\lambda^2 + \frac{\Psi(\mathbf{r})}{E - \varepsilon(\mathbf{r})}\right] \quad (100)$$

Найти решение (100) в ряде случаев проще, чем решение уравнения (94). Если $\Psi(\mathbf{r})$ известна, то функция $a(E)$, определяющая спектр поглощения, находится с помощью формулы, вытекающей из (90)

$$a(E) = -\rho \operatorname{Im} \int_F g(r, E + i\delta) dr = -\rho \operatorname{Im} \int_F \frac{\Psi(\mathbf{r}, E + i\delta) d\mathbf{r}}{E + i\delta - \varepsilon(\mathbf{r})} \quad (101)$$

где F – область, занимаемая решеткой, по которой строится матрица (4).

Развитая схема вычисления спектра поглощения позволяет найти его в аналитическом виде тех случаях, когда прямая диагонализация соответствующей матрицы (4), по крайней мере, проблематична, а иногда и невозможна. При этом точность вычислений оказывается очень высокой, поскольку, как уже было отмечено, спектр поглощения определяется длинноволновыми экситонами, для которых описанная схема решения является, фактически, строгой. Ниже мы приведем соответствующие примеры, первый и простейший из которых относится к случаю одномерной конечной цепочки с экспоненциальным межатомным взаимодействием. Заметим, что даже в этом случае соответствующую матрицу (4) (насколько известно автору) не удастся диагонализировать точно.¹⁰ Тем более это относится матрицам (4), соответствующим рассмотренным далее более сложным задачам о цепочке со скачком расщепления и о сферическом кластере.

Одномерная цепочка с экспоненциальным межатомным взаимодействием

Рассмотрим случай, когда матрица (4) строится на одномерной цепочке, причем межатомное взаимодействие имеет вид

$$w(r) = V \exp\left[-\frac{|r|}{R}\right] \quad (102)$$

¹⁰Известно точное решение аналогичной задачи для случая, когда в матрице (4) учитывается лишь взаимодействие между *ближайшими соседями*.

Тогда с помощью формулы (97) можно получить для оператора $L(d/dr)$ выражение

$$L(d/dr) = \frac{R}{2V} \left(\frac{1}{R^2} - \frac{d^2}{dr^2} \right) \quad (103)$$

а уравнение (100) для этого случая имеет вид

$$\Psi'' + \beta^2 \Psi = -\frac{1}{R^2}, \quad \beta^2 \equiv \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E - \varepsilon(r)} - 1 \right), \quad W \equiv 2\rho V R \quad (104)$$

При помощи соотношений (5) и (102) нетрудно убедиться в том, что W представляет собой ширину экситонной зоны бесконечной цепочки. Уравнение (104) имеет вид сходный с видом неоднородного уравнения Шредингера с "потенциалом" $\beta^2(r)$, поэтому функция Ψ непрерывна с первой производной. Найдем Ψ для конечной цепочки, концы которой имеют координаты $\pm l$. В соответствии с (6), функция $\varepsilon(r)$ имеет в этом случае следующий вид

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} \infty & \text{при } r < -l \text{ и } r > l \\ 0, & \text{при } -l < r < l \end{cases}, \quad (105)$$

т.е область вне цепочки как бы заполнена бесконечно отстроеными атомами, на которые возбуждение попасть не может. Разумеется, это только "переменная" составляющая расщепления, "постоянная" составляющая приводит к сдвигу спектра как целого, и мы нигде не будем ее учитывать. В каждой из областей решение (104) может быть получено явно. Пользуясь симметрией цепочки, его можно записать в виде

$$\Psi(r) = \begin{cases} C_1 \cos[\beta r] - 1/(\beta R)^2 & \text{при } -l < r < l, \\ C_2 \exp[-r/R] + 1 & \text{при } r > l, \\ C_2 \exp[r/R] + 1 & \text{при } r < -l, \end{cases} \quad (106)$$

где, согласно (104), β

$$\beta^2 \equiv \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E} - 1 \right) \quad (107)$$

Если E не слишком близко к нулю (см. ниже), то β имеет смысл волнового числа экситона с энергией E . В областях вне цепочки мы оставили только убывающие экспоненты, так как функция g там обращается в нуль, чего можно последовательно добиться, переходя к пределу $\varepsilon \rightarrow \infty$ при $r > l$ и $r < -l$ только если функция Ψ ограничена. Постоянные $C_{1,2}$ определяются условиями непрерывности Ψ и ее первой производной на концах цепочки. Опуская соответствующие стандартные вычисления, приведем окончательный ответ для функции $g(r)$ внутри цепочки и функции $a(E)$, определяющей спектр поглощения:

$$g(r) = \frac{1}{E - W} \left(1 + \frac{W}{E} \frac{\cos[\beta r]}{\beta l \sin[\beta l] - \cos[\beta l]} \right) \quad (108)$$

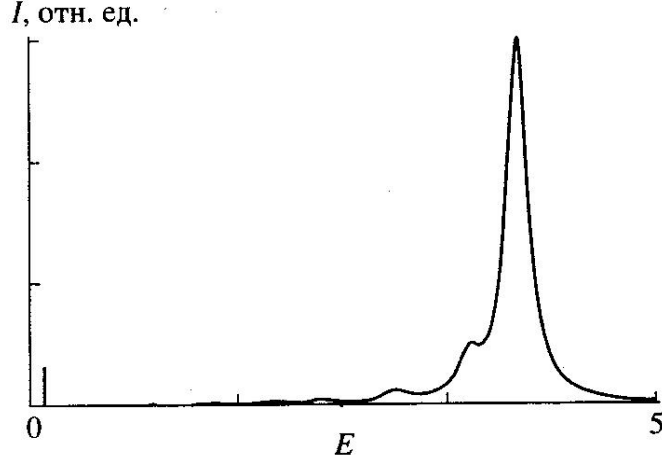


Рис. 3: Спектр поглощения одномерной цепочки, рассчитанный по формулам (101) и (108) при $b = 1$, $l = 50$, $R = 2$, $V = 1$, $\delta = 0.1$, энергия отложена в единицах V

$$a(E) = -2\rho \operatorname{Im} \left\{ \frac{l}{E + i\delta - W} + \frac{W \sin[\alpha l]}{\alpha (E + i\delta) (\alpha l \sin[\alpha l] - \cos[\alpha l])} \right\}, \quad \alpha \equiv -\frac{1}{R} \sqrt{\frac{W}{E + i\delta} - 1}$$

В соответствии со сделанными выше замечаниями о применимости описываемого метода, укажем область значений E , в которой можно пользоваться спектром поглощения, рассчитанным по формулам (101) и (108). Чтобы переход от суммирования к интегрированию в уравнении Дайсона (91) был оправдан, пространственный полупериод $g(r)$ (равный π/β) должен быть больше постоянной решетки b . Это приводит к условию

$$E > E_C \equiv \frac{W}{1 + [\pi R/b]^2} \quad (109)$$

Заметим, что в запрещенной области $g(r)$ быстро осциллирует и дает малый относительный вклад в спектр поглощения, если длина цепочки значительно превышает b . Пример расчета спектра поглощения по формулам (101) и (108) приведен на рис.3, параметры цепочки следующие: $b = 1$, $l = 50$, $R = 2$, $V = 1$, $\delta = 0.1$, энергия отложена в единицах V . Вертикальной чертой на оси абсцисс показана энергия E_C . Видно, что в "запрещенной" условием (109) области спектр практически отсутствует и не представляет интереса. Спектр этой цепочки был также получен путем численной диагонализации соответствующей матрицы (4), но приводить его здесь представлялось нецелесообразным – он полностью совпадает со спектром рис.3.

Рассмотрим здесь также несколько менее тривиальный случай цепочки, в которой

расщепление $\varepsilon(r)$ имеет вид меандра

$$\varepsilon(r) = \begin{cases} \infty & \text{при } r < -h \text{ и } r > h \\ \varepsilon, & \text{при } l < r < h \text{ и } -l > r > -h, \\ 0, & \text{при } -l < r < l \end{cases} \quad (110)$$

Будем считать для простоты выкладок, что эта цепочка замкнута в кольцо, т.е. точка h совпадает с $-h$. Решение уравнения (104) проводится аналогично, той лишь разницей, что необходимо потребовать совпадения Ψ и ее производной в точках h и $-h$. Результат для спектральной функции $a(E)$ таков

$$\begin{aligned} a(E) &= -\rho \operatorname{Im} I(E + i\delta), \quad \text{причем} \\ I(E) &\equiv \int_{-h}^h g(r) dr = \frac{2l}{E - W} + \frac{2(h-l)}{E - W - \varepsilon} + \\ &+ \left(\frac{1}{W - E} - \frac{1}{W + \varepsilon - E} \right) \frac{\beta_1^2 - \beta_2^2}{\beta_1 \beta_2} \frac{2}{\beta_2 \operatorname{ctg}[\beta_1 l] + \beta_1 \operatorname{ctg}[\beta_2 (h-l)]}, \end{aligned} \quad (111)$$

где

$$\beta_i^2 \equiv \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E - \varepsilon_i} - 1 \right), \quad \varepsilon_{1,2} = 0, \varepsilon \quad (112)$$

В данном случае условие применимости (109) нужно дополнить требованием

$$\varepsilon - E_C > E > \varepsilon + E_C \quad (113)$$

так как при энергиях попадающих в E_C -окрестность ε , функция $g(r)$ на участках цепочки с начальным расщеплением ε имеет пространственный период меньший b . Заметим, однако, что вклад указанных участков будет в этом случае мал по сравнению с вкладом остальной части цепочки, где $g(r)$ осциллирует не так быстро, поэтому спектр поглощения может оказаться правдоподобным и при нарушении условия (113).

Пример спектра цепочки со скачком начального расщепления приведен на рис.4. Параметры следующие $b = 1$, $h = 30$, $l = 10$, $R = 2$, $V = 1$, $\delta = 0.1$, $\varepsilon = 2.5$, энергия отложена в единицах V . Верхний график представляет собой спектр полученный численной диагонализацией соответствующей матрицы (4), нижний – спектр, рассчитанный по формуле (111). При компьютерном расчете спектра мы использовали формулу (32), причем входящие туда элементы собственных векторов-столбцов A_{Γ}^{λ} и собственные числа E_{λ} получались прямой компьютерной диагонализацией соответствующей матрицы (4), а ширина линии δ имела приведенное выше значение 0.1.

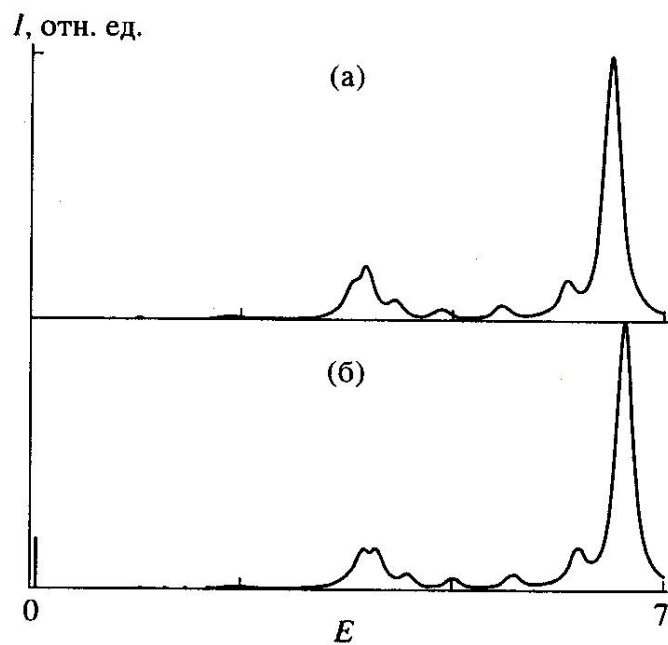


Рис. 4: Спектр поглощения цепочки со скачком начального расщепления при $b = 1$, $h = 30$, $l = 10$, $R = 2$, $V = 1$, $\delta = 0.1$, $\varepsilon = 2.5$, (а) – метод численной диагонализации, (б) – расчет по формуле (111) (энергия отложена в единицах V).

Сферический кластер с взаимодействием типа Юкавы

Изложенный в предыдущем разделе подход без изменения обобщается на случай произвольной размерности. В этом разделе мы рассмотрим систему, представляющую собой сферический фрагмент трехмерной решетки, причем недиагональные элементы матрицы (4) для этого фрагмента определяются взаимодействием Юкавы

$$w(\mathbf{r}) = V \frac{e^{-|\mathbf{r}|/R}}{|\mathbf{r}|} \quad (114)$$

Хорошо известно (и нетрудно проверить с помощью формул (96) и (97)), что

$$\left(\Delta - R^{-2}\right) \left(-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-|\mathbf{r}|/R}}{|\mathbf{r}|}\right) = \delta(\mathbf{r}) \quad (115)$$

Вычислив интеграл λ^{-2} из уравнения (95) в сферической системе координат, находим, что уравнение (100) в данном случае опять имеет вид неоднородного уравнения Шредингера

$$\Delta\Psi + \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} - 1\right) \Psi = -\frac{1}{R^2} \quad (116)$$

где

$$W \equiv 4\pi\rho V R^2 \quad (117)$$

и, следовательно, Ψ непрерывна вместе с первой производной.

Решим теперь задачу о сферическом кластере радиуса σ , т.е. функцию $\varepsilon(\mathbf{r})$ возьмем в виде¹¹

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{r}| < \sigma \\ \infty, & |\mathbf{r}| > \sigma \end{cases} \quad (118)$$

Записывая оператор Лапласа в (116) в сферических координатах, получим для функции Ψ (она имеет только радиальную зависимость) уравнение

$$\left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \beta^2\right) \Psi = -\frac{1}{R^2} \quad (119)$$

где

$$\beta^2 = \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} - 1\right) \quad (120)$$

Величины W и β имеют тот же смысл ширины экситонной зоны бесконечной решетки и волнового вектора экситона с энергией E , что и в предыдущем разделе, поэтому мы

¹¹Такой кластер может моделировать квантовую точку

сохранили для них те же обозначения. В нашем случае

$$\beta^2 = \begin{cases} -R^{-2} & \text{при } r > \sigma \\ (W/E - 1)R^{-2} & \text{при } r < \sigma \end{cases} \quad (121)$$

Общее решение уравнения (119) для обеих областей имеет вид

$$\Psi = -\left(\frac{1}{\beta R}\right)^2 + C_1 \frac{\sin[\beta r]}{r} + C_2 \frac{\cos[\beta r]}{r} \quad (122)$$

Принимая во внимание ограниченность Ψ в области $r > \sigma$, получим, что в этой области

$$\Psi = 1 + a_1 \frac{\exp[-r/R]}{r}, \quad (123)$$

Ψ должна быть ограничена также и при $r = 0$. Учитывая это получим, что в области $r < \sigma$

$$\Psi = EG_\infty + a_2 \frac{\sin[\beta r]}{r} \quad (124)$$

где

$$G_\infty \equiv \frac{1}{E - W} \quad (125)$$

Функция EG_∞ является решением (116) в случае бесконечной однородной решетки, поэтому $\text{Im } G_\infty(E + i\delta)$ определяет спектр поглощения такой решетки. Константы a_1 и a_2 определяются условиями непрерывности Ψ и ее производной при $r = \sigma$. Спектр поглощения определяется по формуле (101), которая имеет в данном случае следующий вид

$$a(E) = -4\pi\rho \text{Im} \int_0^\sigma \frac{\Psi(r, E + i\delta)}{E + i\delta} r^2 dr \quad (126)$$

Результат таков

$$a(E) = -4\pi\rho \text{Im} \left\{ \left[\frac{\sigma^3}{3} - \frac{W(R + \sigma)(\sin[\alpha\sigma] - \alpha\sigma \cos[\alpha\sigma])}{(E + i\delta)\alpha^2(\alpha R \cos[\alpha\sigma] + \sin[\alpha\sigma])} \right] G_\infty(E + i\delta) \right\} \quad (127)$$

где

$$\alpha \equiv -\frac{1}{R} \sqrt{\frac{W}{E + i\delta} - 1} \quad (128)$$

В формуле (127) отчетливо видны два вклада: объемный (первое слагаемое в скобках) и поверхностный (второе слагаемое). Первый обуславливает наличие в спектре линии, соответствующей бесконечной (циклической) решетке, второй – структуры, связанной с

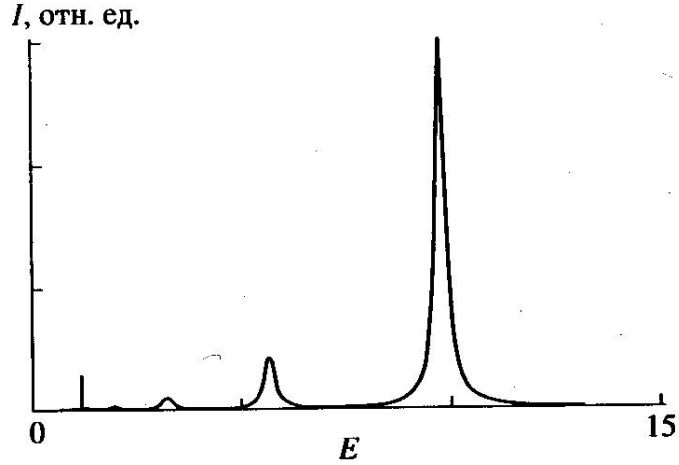


Рис. 5: Спектр поглощения сферического кластера, рассчитанный по формуле (127) при $b = 1$, $V = 1$, $R = 1$, $\sigma = 5$, $\delta = 0.15$ (энергия отложена в единицах V).

конечностью кластера. На рис.5 приведен спектр поглощения сферического кластера, рассчитанный по формуле (127) при следующих значениях параметров $b = 1$, $V = 1$, $R = 1$, $\sigma = 5$, $\delta = 0.15$, энергия отложена в единицах V . Вертикальной чертой показана энергия E_C . Спектр, полученный численной диагонализацией соответствующей матрицы (4) с помощью формулы (32), полностью совпадает со спектром рис.5 и не приводится. Необходимо, однако, заметить следующее. Потенциал Юкавы имеет особенность при $r = 0$ поэтому при численном решении возникает вопрос в каком виде брать диагональные элементы матрицы (4) $H_{rr'}$. Не оказывая влияния на форму спектра, они могут дать его сдвиг. При численной проверке спектра рис.5 мы полагали $H_{rr'} = 0$, так как при вычислении интегралов с потенциалом Юкавы в вышеизложенной схеме область $r \sim 0$ не дает существенного вклада по причине малости элемента объема $4\pi r^2 dr$ и всюду фигурирует, по сути, эффективный потенциал $w(\mathbf{r})r^2$, который при $r = 0$ обращается в нуль. Производились компьютерные вычисления и при других значениях параметров, так же в полном согласии с формулой (127).

На рис.6 приведен спектр сферического кластера $b = 1$, $V = 1$, $R = 2$, $\sigma = 30$, $\delta = 0.6$. Сравнение с численной диагонализацией не проводилось, поскольку за обозримое компьютерное время решить такую задачу невозможно. Из рис.6 видно, что, несмотря на значительный радиус кластера, его спектр отличается от спектра бесконечной решетки

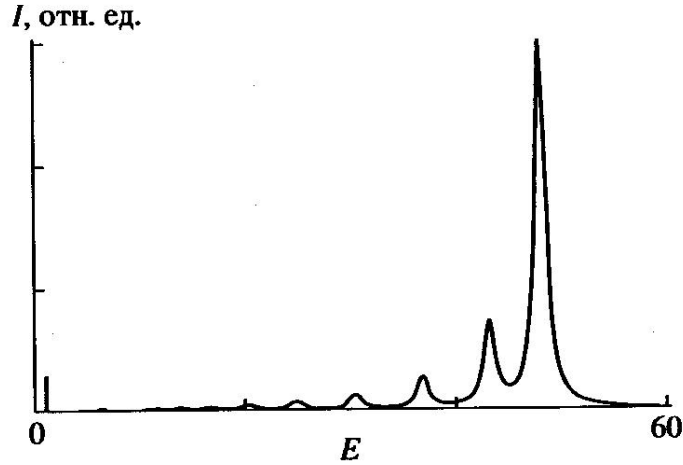


Рис. 6: Спектр поглощения сферического кластера, рассчитанный по формуле (127) при $b = 1$, $V = 1$, $R = 2$, $\sigma = 30$, $\delta = 0.6$ (энергия отложена в единицах V).

(синглет при $E = W$) и обнаруживает структуру. Заметную структуру (в масштабе ширины экситонной зоны W) обнаруживают спектры кластеров радиусом $150b$.

Всюду выше для проверки получаемых результатов мы (когда это оказывалось возможным) использовали численный (компьютерный) эксперимент. Относительно применимости полученных выше результатов для интерпретации экспериментов с реальными объектами (типа упомянутых J -агрегатов и квантовых точек) сделаем следующее замечание. Интерпретация *реальных* экспериментов, грубо говоря, состоит из двух этапов. На первом этапе строится математическая модель изучаемого реального объекта и получаются соответствующие этой модели уравнения. На втором этапе производится решение этих модельных уравнений и результаты сравниваются с данными эксперимента. При этом ошибки могут возникать в процессе выполнения как первого, так и второго из перечисленных этапов. Например, при выполнении первого этапа, как правило, невозможно исходить из первых принципов, поскольку изучаемые системы обычно чрезвычайно сложны. По этой причине приходится пренебрегать теми или иными взаимодействиями, причем аргументы, которые при этом приводятся, не всегда убедительны. При реализации математической модели на втором этапе также часто возникают трудности, связанные с невозможностью точно решить (не точные!) модельные уравнения. В этой связи заметим, что развитый выше подход к решению модельных задач, связанных с матрицей (4), на

наш взгляд, свободен от последнего недостатка и, если интерпретация реального эксперимента с J -агрегатами или квантовыми точками с помощью соотношений (108) или (127) окажется неудачной, то это следует приписать *неадекватности модели*, а не неточности решения соответствующих модельных задач. Результаты этого раздела работы опубликованы в [64].

0.3.2 Прохождение света через слоистую систему в экситонной области спектра

В 1957 г. С.И.Пекаром теоретически было показано [12], что в области экситонного поглощения в неограниченных кристаллах в одной и той же поляризации могут распространяться *две* волны, имеющие разные фазовые скорости (и, соответственно, разные показатели преломления). Это связано с эффектами пространственной дисперсии, при которых дисперсионное уравнение, связывающее квадрат волнового вектора волны с ее частотой, в области экситонного поглощения становится нелинейным и может иметь более одного (обычно два) решения. В связи с этим при рассмотрении задачи о падении электромагнитной волны из вакуума на кристалл, восприимчивость которого имеет нелокальный характер, классических максвелловских граничных условий оказывается недостаточно для определения амплитуд *двух* прошедших и одной отраженной волн¹² и возникает вопрос о так называемых *дополнительных граничных условиях*.

Несмотря на то, что эта задача активно исследовалась (см., например, [81, 82, 83, 84, 85], а также монографию [13]), представляют интерес простые модели экситонов, допускающие точное решение нелокальных уравнений Максвелла в ограниченных пространственно-неоднородных средах. Модель экситонов Френкеля и соответствующая ей матрица гамильтониана (4), изучаемая в настоящей диссертационной работе, дают пример такой модели. Сразу отметим, что экситонный характер возбуждений в кристалле приводит к тому, что его восприимчивость (т.е., по-сути, *оператор*, определяющий поляризацию кристалла при заданном электромагнитном поле) может зависеть от его формы. В частности, наличие у кристалла границы приводит к тому, что его восприимчивость отличается от таковой для бесконечного кристалла. Поскольку при заданном распределении восприимчи-

¹²В классической оптике неизвестных амплитуд всего две – прошедшей и падающей волн.

ности среды уравнения Максвелла дают однозначное решение задачи о распространении волн, то ясно, что для получения дополнительных граничных (или каких-либо других) условий, позволяющих определить амплитуды всех фигурирующих в задаче волн, следует найти восприимчивость *ограниченного* кристалла. Поскольку восприимчивость связана с функцией Грина, то для этой цели оказывается удобным использовать обобщение метода, описанного в предыдущем разделе.

Как будет видно несколько ниже, для решения задачи о прохождении электромагнитной волны через слой вещества, возбуждения которого описываются гамильтонианом типа (4), нам потребуется функция $g_{\mathbf{r}}(\mathbf{q})$, представляющая собой функцию Грина в координатном представлении, в которой по второму индексу произведено преобразование Фурье, т.е

$$g_{\mathbf{r}}(\mathbf{q}) = \rho \int G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] d\mathbf{r}', \quad (129)$$

которая так же является функцией Грина, но только в "смешанном" пространственно-импульсном представлении. Эта функция будет играть ту же роль, что и функция (89), введенная в предыдущем разделе, и мы употребляем для ее обозначения ту же букву. Аналогично введем обобщение функции (93):

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv g_{\mathbf{r}}(\mathbf{q}) (E - \varepsilon(\mathbf{r})) \quad (130)$$

Выполняя в уравнении Дайсона (91) преобразование Фурье по второму индексу и переходя от суммирования к интегрированию, для функции $\psi(\mathbf{r})$ можно получить уравнение, являющееся обобщением (94):

$$\psi(\mathbf{r}) = \rho \int \left[\lambda^2 + \frac{\psi(\mathbf{r}')}{E - \varepsilon(\mathbf{r}')} \right] w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{r}' \quad (131)$$

$$\lambda^{-2} \equiv \rho \int w(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}] d\mathbf{r}$$

Здесь ρ – плотность решетки. Используя методику описанную в предыдущем разделе, можно сказать, что для широкого класса функций $w(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}]$ можно построить дифференциальный оператор $L(\partial/\partial\mathbf{r})$, такой что $w(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}]$ будет для него функцией источника, т.е

$$L(\partial/\partial\mathbf{r}) w(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}] = \delta(\mathbf{r}) \quad (132)$$

Для этого следует записать (132) в представлении Фурье

$$f(\mathbf{k}) \equiv (2\pi)^{-d} \int \exp[i(\mathbf{q} - \mathbf{k})\mathbf{r}] \mathbf{w}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (133)$$

$$L(ik)f(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-d}$$

здесь d – размерность пространства. Из последнего (алгебраического) уравнения определяется вид функции L . Рассмотрим теперь неоднородное уравнение

$$L(\partial/\partial\mathbf{r})\psi = \Phi(\mathbf{r}). \quad (134)$$

Частное решение этого уравнения можно получить с помощью функции источника $w(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}]$

$$\psi = \int w(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \Phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (135)$$

и если

$$\Phi(\mathbf{r}) = \rho \left[\lambda^2 + \frac{\psi(\mathbf{r})}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} \right], \quad (136)$$

то (135) совпадает с (131). Поэтому интересующее нас решение $\psi(\mathbf{r})$ интегрального уравнения (131) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$L(\partial/\partial\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \rho \left[\lambda^2 + \frac{\psi(\mathbf{r})}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} \right] \quad (137)$$

При помощи формул (133) нетрудно убедиться в том, что если функция $w(\mathbf{r})$ экспоненциальна (при $d = 1$) или имеет вид потенциала Юкавы (при $d = 3$) то L является линейным дифференциальным оператором второго порядка и уравнение (137) может быть в ряде случаев решено точно. Отметим, что проведенное рассмотрение справедливо и в случае, если плотность решетки ρ меняется в пространстве – это приводит к пространственной зависимости λ

Функция Грина кристаллического слоя

Поскольку мы имеем в виду рассмотреть задачу о прохождении электромагнитной волны через модельный слой двухуровневых атомов, то в этой части будет получена функция Грина такого слоя. Как было указано выше, уравнение (137), определяющее функцию Грина, получается особенно простым, если межатомное взаимодействие взять в виде потенциала Юкавы (114). В этом случае, действуя в соответствии со схемой, описанной в

предыдущей части, получаем, что $f(\mathbf{k})$, $L(\nabla)$ и уравнение (137) для ψ имеют соответственно вид

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}) &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{2V}{(q-k)^2 + R^{-2}} \\ L(\nabla) &= \frac{1}{4\pi V} \left[(q + i\nabla)^2 + \frac{1}{R^2} \right] \\ \Delta\psi - 2i(\mathbf{q}, \nabla\psi) + \psi \left(\frac{4\pi\rho V}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} - \frac{1}{R^2} - q^2 \right) &= -q^2 - \frac{1}{R^2} \end{aligned} \quad (138)$$

Нетрудно показать, совершая в последнем уравнении преобразование Фурье, что функция

$$\Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \equiv \rho^{-1} \int d\mathbf{q} \psi(\mathbf{r}) \exp[-i\mathbf{q}\mathbf{r}] = (E - \varepsilon(\mathbf{r})) G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \quad (139)$$

удовлетворяет уравнению

$$\Delta_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} + Q^2(E) \Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \frac{1}{\rho} \Delta_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{\rho R^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (140)$$

где

$$Q^2(E) \equiv \frac{1}{R^2} \left(\frac{W_0}{E - \varepsilon(\mathbf{r})} - 1 \right), \quad W_0 \equiv 4\pi\rho V R^2 \quad (141)$$

причем W_0 имеет (аналогично (117)) смысл ширины экситонной зоны бесконечной решетки двухуровневых атомов. Поскольку мы рассматриваем однородный слой ограниченный плоскостями $z = l$ и $z = -l$ функция $\varepsilon(\mathbf{r})$ имеет вид аналогичный (105)

$$\varepsilon = \begin{cases} \infty & \text{при } z > l \text{ или } z < -l, \\ \varepsilon & \text{при } l > z > -l, \end{cases} \quad (142)$$

т.е. внутри слоя атомное расщепление равно ε , а внешность слоя как бы заполнена бесконечно отстроеными атомами. Очевидно, что ψ (см. (130)) зависит в этом случае только от z . Поэтому внутри и вне слоя ψ удовлетворяет соответственно уравнениям

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi - 2iq_z \frac{d}{dz} \psi + \left(\frac{4\pi\rho V}{E - \varepsilon} - \frac{1}{R^2} - q^2 \right) \psi = -q^2 - \frac{1}{R^2} \quad (143)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi - 2iq_z \frac{d}{dz} \psi - \left(\frac{1}{R^2} + q^2 \right) \psi = -q^2 - \frac{1}{R^2} \quad (144)$$

Здесь q_z — z -проекция \mathbf{q} . Общее решение каждого из этих уравнений может быть несложно получено (при этом удобно использовать подстановку $\psi = \Theta \exp[iq_z z]$, которая устраняет члены, пропорциональные первой производной). В каждой из областей решение содержит две произвольные постоянные, т.е. получается 6 констант, подлежащих определению.

Нетрудно убедиться в том, что решения вне слоя содержат растущие экспоненты, коэффициенты при которых необходимо положить равными нулю, так как решение должно быть ограничено как функция z вне слоя. Это требование вытекает из того, что ψ связана с функцией Грина, которая должна вне слоя обращаться в нуль, а этого можно последовательно добиться переходя к пределу $\varepsilon(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$ вне слоя только при условии ограниченности ψ вне слоя. Таким образом остаются 4 неизвестные константы. Интересующее нас решение во всем пространстве должно быть непрерывно вместе с первой производной – ход рассуждений здесь такой же, как при выводе требований непрерывности волновой функции и ее первой производной при решении уравнения Шредингера со ступенчатым потенциалом типа $\varepsilon(\mathbf{r})$. Следовательно, 4 условия непрерывности на границах слоя позволяют определить все параметры решения. Опуская эти простые по смыслу, но громоздкие выкладки, приведем окончательный результат для функции Грина (129)

$$g_{\mathbf{r}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{E - \varepsilon - W_{\mathbf{q}}} \left[1 - \frac{W_{\mathbf{q}}}{E - \varepsilon} \left\{ F(\eta, q_z) e^{i[q_z + \eta]z} + F(-\eta, q_z) e^{i[q_z - \eta]z} \right\} \right], \quad -l < z < l \quad (145)$$

где

$$F(\eta, q_z) \equiv \frac{(1 + q_z \eta \beta^2) \sin[(\eta - q_z)l] + \beta(\eta - q_z) \cos[(\eta - q_z)z]}{[1 - (\eta \beta)^2] \sin[2\eta l] + 2\eta \beta \cos[2\eta l]} \quad (146)$$

$$\beta^{-1} \equiv \sqrt{\frac{1}{R^2} + q_{\perp}^2}, \quad \eta \equiv \sqrt{\frac{4\pi\rho V}{E - \varepsilon} - \frac{1}{R^2} - q_{\perp}^2}, \quad W_{\mathbf{q}} \equiv \frac{W_0}{1 + q^2 R^2}$$

Здесь η имеет смысл z -проекции волнового вектора "резонансного" экситона с энергией E , а $W_{\mathbf{q}}$ представляет собой закон дисперсии экситонов в неограниченной решетке, q_{\perp} – составляющая \mathbf{q} в плоскости, перпендикулярной оси z . В следующем разделе мы используем эту функцию Грина для решения задачи о прохождении электромагнитной волны через рассматриваемый слой.

Нормальное падение оптической волны на слой с экситонным характером восприимчивости.

В этом разделе мы решим задачу о нормальном падении электромагнитной волны описанный выше модельный слой двухуровневых атомов. Будем считать, что вектор поляризации параллелен вектору электрического поля падающей волны (т.е. лежит в плоскости xy) и зависит только от координаты z . Следовательно, $\text{div}\mathbf{P} = 0$. Тогда, считая зависимость всех полей от времени гармонической с частотой ω и вводя волновое число $k = \omega/c$

(c – скорость света в вакууме), из уравнений Максвелла можно получить следующее уравнение, связывающее электрическое поле \mathbf{h} и поляризацию \mathbf{P} :

$$(k^2 + \Delta)\mathbf{h} = -4\pi k^2 \mathbf{P} \quad (147)$$

С другой стороны поля \mathbf{h} и \mathbf{P} связаны через восприимчивость, которую мы считаем скаляром и которая, как было показано выше (см. формулу (24)), пропорциональна функции Грина:

$$4\pi P_{\mathbf{r}} = -E_d \rho \int G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} h_{\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' + 4\pi \alpha h_{\mathbf{r}} \quad (148)$$

Здесь $E_d = 4\pi d^2 \rho$ (см. формулу (24)), а α – фоновая поляризуемость рассматриваемого слоя. Вид функции $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ (с точностью до преобразования Фурье) для рассматриваемого случая определяется уравнением (145). Таким образом, (145), (147) и (148) представляют собой уравнения поля и материальные уравнения слоя двухуровневых атомов и полностью исчерпывают физическую постановку задачи.

Убедимся теперь в том, что в областях, где $\varepsilon(\mathbf{r})$ не зависит от \mathbf{r} и равно ε , для $h_{\mathbf{r}}$ можно написать замкнутое уравнение. Подставим выражение для поляризации (148) в правую часть (147)

$$(k^2 + \Delta)h_{\mathbf{r}} = E_d k^2 \rho \int G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} h_{\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' - 4\pi \alpha k^2 h_{\mathbf{r}} \quad (149)$$

и подействуем на это уравнение оператором Лапласа. Полученный результат сложим с (149), предварительно домножив (149) на Q^2 (см. 141). Тогда под интегралом в правой части этой суммы сомножителем $h_{\mathbf{r}}$ будет

$$\Delta_{\mathbf{r}} G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} + Q^2 G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \frac{1}{E - \varepsilon} \left(\frac{1}{\rho} \Delta_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{\rho R^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) \quad (150)$$

Здесь мы использовали уравнения (139) и (140). Таким образом интеграл можно взять, исключить $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ и получить для $h_{\mathbf{r}}$ уравнение

$$\Delta^2 h + B \Delta h + C h = 0 \quad (151)$$

где

$$B \equiv Q^2 + k^2 \left(1 + 4\pi \alpha - \frac{E_d}{E - \varepsilon} \right), \quad C \equiv k^2 Q^2 \left(1 + 4\pi \alpha \right) + \left(\frac{k}{R} \right)^2 \frac{E_d}{E - \varepsilon} \quad (152)$$

Заметим, что искомое решение уравнений (145), (147), (148) обязательно удовлетворяет (151), но не наоборот. Нетрудно убедиться в том, что волновые ($\sim \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})$) решения (151)

имеют закон дисперсии волн Пекара в бесконечной решетке, определяемый уравнением

$$k^2 - q^2 = k^2 \left(\frac{E_d}{E - \varepsilon - W_{\mathbf{q}}} - 4\pi\alpha \right) \quad (153)$$

В этом можно убедиться подставив в (149) функцию Грина бесконечной решетки.

Будем теперь искать решения (149) внутри рассматриваемого слоя в следующем виде

$$h_{\mathbf{r}} = \sum_q h_q \exp[iqz] \quad (154)$$

Переходя к функции Грина слоя, в которой по второму индексу произведено преобразование Фурье, т.е. к функции Грина в форме (145) и используя (149), получим для амплитуд h_q следующее соотношение

$$\sum_q \left[(kn)^2 - q^2 \right] h_q e^{iqz} = E_d k^2 \sum_q g_{\mathbf{r}}(-q) h_q e^{iqz} \quad (155)$$

Здесь $n^2 \equiv 1 + 4\pi\alpha$ – квадрат фонового показателя преломления. При получении (155) существенно то, что функция Грина $G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ отлична от нуля только в области слоя поэтому при вычислении преобразования Фурье интегрирование идет только по области между плоскостями $z = \pm l$.

Используя функцию Грина (145) и приравнивая коэффициенты при $\exp[iqz]$, получим что при $q \neq \pm\eta$, должно выполняться соотношение (153). Таким образом, все пространственные гармоники электрического поля с волновыми векторами, отличными от волнового вектора "резонансного" экситона $\pm\eta$, должны иметь закон дисперсии (153) волн Пекара в бесконечной решетке. Из выражения (145) для функции $g_{\mathbf{r}}(-q)$ видно, что умножение этой функции на пространственную гармонику поля $\exp[iqz]$ приводит, во-первых, к появлению гармоник поляризации с этим же волновым вектором (из-за наличия в (145) "объемной" функции Грина бесконечной решетки $1/(E - \varepsilon - W_{\mathbf{q}})$) и, во-вторых, к появлению гармоник поляризации $\sim \exp[\pm i\eta z]$, возникающих из-за наличия "поверхностной" составляющей функции Грина (145), пропорциональной функциям $F(\pm\eta, -q)$. Появление гармоник поляризации $\sim \exp[\pm i\eta z]$ приведет к появлению соответствующих гармоник поля h и, следовательно, полное поле в слое будет иметь кроме составляющей с законом дисперсии Пекара (153) также составляющую с экситонным законом дисперсии. Однако, в силу того, что полное поле должно удовлетворять уравнению (151) (которому волны с законом дисперсии Пекара (153) заведомо удовлетворяют), "экситонная" составляющая

должна иметь нулевую амплитуду. Это означает что амплитуды гармоник поляризации с волновыми векторами $\pm\eta$ равны нулю. Используя (145) и (155), получаем, что это условие накладывает на амплитуды "разрешенных" гармоник с законом дисперсии (153) следующие связи

$$\sum_q \frac{W_{\mathbf{q}}}{E - W_{\mathbf{q}}} F(\eta, -q) h_q = 0, \quad \sum_q \frac{W_{\mathbf{q}}}{E - W_{\mathbf{q}}} F(-\eta, -q) h_q = 0 \quad (156)$$

Здесь суммирование производится только по "пекаровским" волновым векторам, определенным из уравнения дисперсии (153). Таким образом "чистые" волны Пекара в слое существовать не могут – они могут возникать лишь группой с парциальными амплитудами, удовлетворяющими условиям (156), которые и являются искомыми дополнительными условиями и в сочетании с граничными условиями Максвелла позволяют полностью поставить и решить задачу о распространении электромагнитной волны через описываемый слой двухуровневых атомов. Условия Максвелла заключаются в требовании непрерывности поля $h_{\mathbf{r}}$ и его первой производной по z на границах слоя. Принимая во внимание явный вид (146) функции $W_{\mathbf{q}}$, нетрудно убедиться в том, что дисперсионное уравнение (153) сводится к биквадратному уравнению и имеет, таким образом, четыре корня, которые мы обозначим $\pm q_1$ и $\pm q_2$. Тогда электрическое поле $h_{\mathbf{r}}$ внутри слоя имеет вид

$$h_{\mathbf{r}} = h_{q_1} e^{iq_1 z} + h_{-q_1} e^{-iq_1 z} + h_{q_2} e^{iq_2 z} + h_{-q_2} e^{-iq_2 z}, \quad \text{при } -l < z < l \quad (157)$$

Падающую, отраженную и прошедшую волны берем соответственно в виде: $A \exp[-ikz]$, $R \exp[ikz]$ и $T \exp[-ikz]$:

$$h_{\mathbf{r}} = \begin{cases} A \exp[-ikz] + R \exp[ikz], & \text{при } z > l, \\ T \exp[-ikz], & \text{при } z < -l \end{cases} \quad (158)$$

Тогда четыре максвелловских граничных условия и два условия (156) позволяют выразить амплитуды четырех волн в слое и амплитуды отраженной R и прошедшей T волн через амплитуду падающей волны A . Явные формулы для коэффициентов отражения R/A и пропускания T/A возможны, но очень громоздки и эту задачу проще сразу запрограммировать. Пример подобного вычисления приведен на рис.7, где показаны спектры отражения и пропускания пластинки толщиной 160 нм. На спектрах, кроме основной резонансной особенности, виден также ряд слабых экстремумов, связанных с квантованием движения экситона в пластинке.

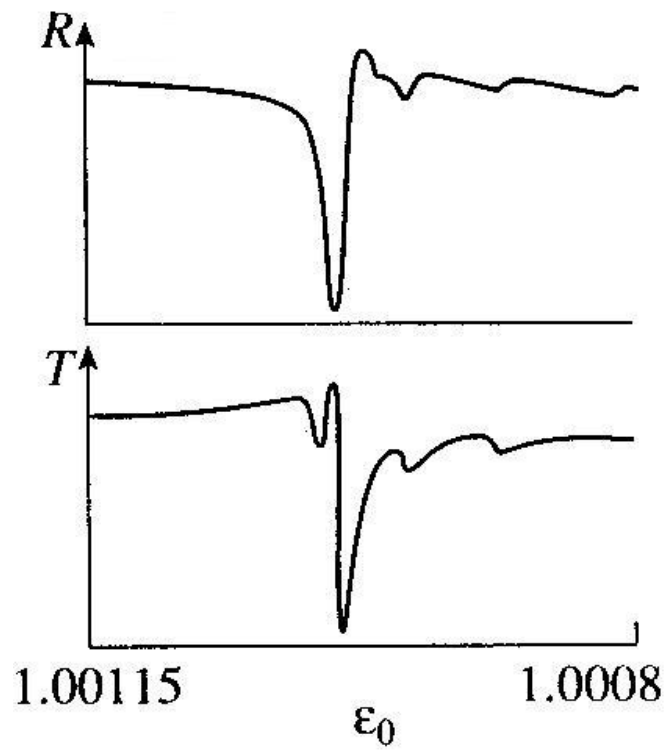


Рис. 7: Спектры отражения и пропускания пластинки толщиной 160 нм, рассчитанные с помощью формул (156) Эффективная масса экситона в расчете принималась равной удвоенной массе электрона, взятой со знаком минус.

Заканчивая этот раздел, сделаем следующее замечание относительно возможности использования описанной модели (и методики решения соответствующей математической задачи) для обработки реальных экспериментов, например, по спектроскопии толстых квантовых ям. Трудно указать физические причины, которые могли бы приводить к юкавскому виду межатомного взаимодействия в реальных системах,¹³ и в этом смысле используемая модель экситона Френкеля является отвлеченной. В защиту этой модели можно сказать, что в теории экситонов часто оказывается достаточным приближение эффективной массы, которое адекватно передает закон дисперсии экситонов при небольших волновых векторах. Подбирая амплитуду V и радиус R потенциала Юкавы (114) можно "смоделировать" не только эффективную массу экситона, но и ширину экситонной зоны. При этом, поскольку важнейшие качественные свойства реальной системы – резонансный и нелокальный характер восприимчивости – в модели учтены, можно рассчитывать на то, что и реальный эксперимент окажется возможным описать приведенными в этом разделе соотношениями при надлежащей подгонке параметров. Представленные в этом разделе диссертации результаты опубликованы в [65]

0.3.3 Рассеяние света назад конечной двумерной кристаллической пластинкой в области экситонного резонанса – антизеркальное отражение

Появившиеся в последнее время технологические возможности создания квазидвумерных кристаллических структур – квантовых ям (спектроскопия таких объектов описана, например, в [80]), пленок Ленгмюра-Блоджетт [8, 9, 10] – обуславливают интерес к спектроскопии таких объектов. Оптические возбуждения таких систем носят экситонный характер, вследствие чего их оптическая восприимчивость должна иметь существенно нелокальный характер. Последнее обстоятельство приводит к большим эффектам пространственной дисперсии, об одном из которых пойдет речь в этом разделе диссертационной работы. Этот эффект возникает в *ограниченной* системе с экситонным характером возбуждений и может быть проанализирован с помощью изучаемой в диссертации мо-

¹³Возможно, обменный механизм переноса может давать похожую зависимость от межатомного расстояния.

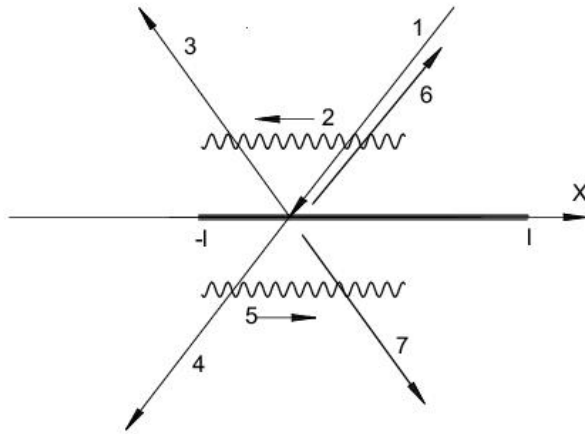


Рис. 8: Рассеяние плоской монохроматической волны на двумерной полосе с экситоном. 1 – падающая плоская волна, 2 – возникающий под действием падающей волны экситон, движущийся справа налево, и соответствующая ему волна поляризации, 3,4 – обычные отраженная и прошедшая волны, 5 – волна поляризации соответствующая экситону, отраженному от левого края полосы, 6 и 7 – рассеянные волны, порожденные отраженным экситоном.

дельной матрицы (4).

Рассмотрим конечную плоскую (двумерную) кристаллическую структуру (рис.8) представляющую собой полосу в плоскости XU , бесконечную в U -направлении и занимающую интервал $x \in [-l, l]$ в направлении X . Пусть на эту полосу из верхнего полупространства под некоторым углом падает плоская волна. При этом в полосе возникает экситон распространяющийся в направлении, определяемом проекцией волнового вектора падающей волны на плоскость XU , в данном случае – справа налево. С этим экситоном связана волна поляризации распространяющаяся в том же направлении, которая порождает рассеянное вторичное поле – обычную отраженную (под углом падения) и прошедшую волны (рис.8). Однако, благодаря *конечности* полосы в X -направлении, в ней возникнет экситон отраженный от левой границы полосы, двигающийся слева направо¹⁴. Волна поляриза-

¹⁴Говоря более строго, экситонные состояния в полосе представляют собой стоячие волны, т.е. сумму двух распространяющихся в противоположных направлениях бегущих волн.

ции соответствующая этому экситону порождает в верхнем полупространстве, рассеянную волну, распространяющуюся *навстречу* падающей и симметричную волну в нижнем полупространстве (рис.8). Таким образом, в области экситонного резонанса рассеяние плоской монохроматической волны двумерной конечной полосой сопровождается нетривиальным рассеянием назад в верхнем полупространстве и симметричным преломлением в нижнем. В этом и состоит предлагаемый эффект, количественное описание которого оказывается возможным произвести, используя модельный гамильтониан с матрицей (4). Подчеркнем, что возникновение отраженной волны поляризации в двумерной полосе возможно только в той спектральной области, где оптическая восприимчивость полосы имеет нелокальный (экситонный) характер и описываемый эффект есть *проявление большой пространственной дисперсии в условиях нарушения трансляционной симметрии*. Наблюдение этого эффекта может дать информацию о длине свободного пробега экситона. Ниже с помощью простейшей модели экситона Френкеля (4), допускающей последовательное математическое рассмотрение, мы покажем, что указанный эффект действительно должен наблюдаться. Отметим, что возникновение обратного рассеяния описывалось, например, в работах [88, 89, 90, 91], однако, детали механизма рассеяния были несколько другими и экситонная специфика эффекта была не столь сильно выражена.

Математическое рассмотрение состоит из двух этапов. На первом этапе будет решена задача рассеяния на плоской полосе, причем для амплитуд рассеянных волн будет получено интегральное уравнение, в котором фигурирует нелокальная восприимчивость полосы $\chi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$, связывающая поляризацию с электрическим полем:

$$p_{\mathbf{r}} = \int \chi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} h_{\mathbf{r}'} d\mathbf{r}' \quad (159)$$

Здесь $p_{\mathbf{r}}$ – поверхностная поляризация, $h_{\mathbf{r}}$ – напряженность электрического поля. Если нелокальный вклад в восприимчивость определяется экситонами и \mathbf{H} – есть экситонный гамильтониан, то в соответствии с формулой (24)¹⁵, нелокальная восприимчивость двумерного слоя на частоте ω пропорциональна экситонной функции Грина $\mathbf{G}(E) = (E - \mathbf{H})^{-1}$ в координатном представлении:

$$\chi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \varkappa G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(E), \quad (160)$$

¹⁵Считая частоту возбуждающего поля достаточно большой и положительной, последним слагаемым в формуле (24), связанным с отрицательной частотой, можно пренебречь.

причем $E = \hbar\omega$, а \mathfrak{e} определяется дипольным моментом молекулярного оптического перехода и плотностью молекул (см. формулу (24) и текст при ней).

Второй этап расчета заключается в вычислении этой функции. Для этого мы применяем простейшую модель двумерного экситона Френкеля с гамильтонианом типа (4), в которой межмолекулярное взаимодействие $w(\mathbf{r})$ выбирается в виде, удобном для вычислений. Применяемая модель очень проста и в *количественном* отношении едва ли соответствует какой-либо реальной физической системе, однако, все *качества* экситонной специфики моделью учитываются. Параметры модели (радиус межмолекулярного взаимодействия и его амплитуда) позволяют смоделировать эффективную массу экситона и ширину экситонной зоны.

Рассеяние света на полосе.

В этом разделе мы приведем решение задачи рассеяния на двумерной полосе, при учете пространственной дисперсии. Рассмотрим слой, плоскость которого совпадает с плоскостью XU . Пусть на него из верхнего полупространства под углом ϕ падает плоская волна, имеющая амплитуду \mathcal{A} , частоту ω и поляризованная в направлении Y . Будем считать слой изотропным. Тогда электрические поля рассеянных волн и поляризация слоя будут иметь только Y -компоненты и зависеть только от x и z . Рассеянное поле в верхнем полупространстве представим в виде суммы отходящих от слоя плоских волн. Тогда полное электрическое поле $h(\mathbf{r})$ в верхнем полупространстве можно представить в виде:

$$h(x, z > 0) = \mathcal{A} \exp -ik(x \sin \phi + z \cos \phi) + \int dq R_q \exp i \left[qx + z \sqrt{k^2 - q^2} \right], \quad (161)$$

причем $k \equiv \omega/c$, c – скорость света в среде вокруг слоя. Аналогичной суммой представим поле в нижнем полупространстве:

$$h(x, z < 0) = \int dq T_q \exp i \left[qx - z \sqrt{k^2 - q^2} \right] \quad (162)$$

Поляризация отлична от нуля только в плоскости слоя, поэтому распределение поляризации во всем пространстве можно записать в виде:

$$\mathcal{P}(x, z) = p(x) \delta(z) \quad (163)$$

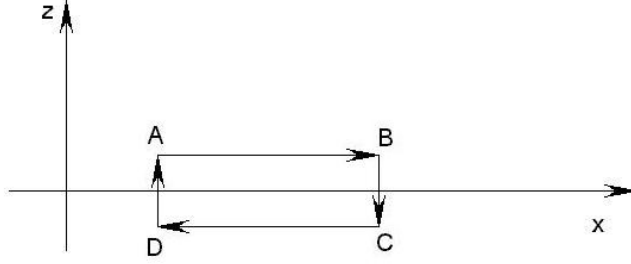


Рис. 9: К вычислению циркуляции магнитного поля.

причем функцию $p(x)$ – поверхностную поляризацию слоя – также представим суммой гармоник:

$$p(x) = \int dq P_q \exp i(qx) \quad (164)$$

Уравнения Максвелла позволяют связать компоненты поля в верхнем (R_q) и нижнем (T_q) полупространствах с компонентами поляризации слоя (P_q) следующим образом. Рассмотрим малый прямоугольный контур, пересекающий рассматриваемый слой, причем плоскость этого контура параллельна плоскости ZX (рис.9).

Уравнение Максвелла

$$\oint \mathbf{H} d\mathbf{l} = i \left(\frac{\omega}{c} \right) \iint (\mathbf{h} + 4\pi\mathcal{P}) d\mathbf{S} \quad (165)$$

(здесь \mathbf{H} – магнитное, а \mathbf{h} – электрическое поле) связывает циркуляцию магнитного поля по этому контуру с потоком электрической индукции через него. Устремляя размеры контура к нулю и вычисляя двумерный интеграл от функции (163), получаем что x -компоненты магнитного поля выше и ниже слоя связаны следующим образом:

$$H_x(x, +0) - H_x(x, -0) = 4\pi i \left(\frac{\omega}{c} \right) p(x) \quad (166)$$

Здесь мы воспользовались ограниченностью электрического поля, благодаря которой интеграл от него по площади контура стремиться к нулю при уменьшении размера контура в z -направлении, в отличие от аналогичного интеграла от поляризации. Последний остается конечным при уменьшении размера контура в z -направлении благодаря наличию δ -функции в (163). Выражая в формуле (166) магнитное поле через электрическое с по-

мощью уравнения Максвелла

$$\mathbf{rot} \mathbf{h} = -i \frac{\omega}{c} \mathbf{H}, \quad (167)$$

получим, что для нашей задачи электрические поля в верхнем и нижнем полупространствах должны удовлетворять соотношению:

$$\frac{\partial h}{\partial z}(x, +0) - \frac{\partial h}{\partial z}(x, -0) = 4\pi \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 p(x) \quad (168)$$

Напомним, что в нашем случае электрические поля имеют только y -компоненту и именно она фигурирует в (168). Аналогично с помощью уравнения Максвелла

$$\oint \mathbf{h} d\mathbf{l} = -i \frac{\omega}{c} \int \int \mathbf{H} d\mathbf{S} \quad (169)$$

получается условие:

$$h(x, +0) = h(x, -0) \quad (170)$$

Условия (168) и (170) позволяют связать амплитуды пространственных гармоник поля с одинаковым q в нижнем и верхнем полупространствах следующим образом:

$$T_q - R_q = \mathcal{A} \delta(q + k \sin \phi) \quad (171)$$

$$T_q + R_q + \frac{4\pi i k^2}{\sqrt{k^2 - q^2}} P_q = \mathcal{A} \delta(q + k \sin \phi) \quad (172)$$

Гармоники поляризации в слое можно связать с электрическим полем в слое

$$h(x, 0) = \int dq T_q \exp iqx \quad (173)$$

при помощи функции Грина экситона (и связанной с ней нелокальной восприимчивости), которая, будучи трансляционно-симметричной в y -направлении, зависит только от $y - y'$:

$$p(x) = \int dq P_q \exp iqx = \varkappa \int dx' dy' G_{xx'y-y'} h(x', 0) \quad (174)$$

или

$$P_q = \frac{\varkappa}{2\pi} \int dq' \tilde{G}_{qq'} T_{q'} \quad (175)$$

где

$$\tilde{G}_{qq'} \equiv \int dx dx' dy' G_{xx'y-y'} \exp i(qx - q'x') \quad (176)$$

Система уравнений (171), (172) позволяет найти компоненты рассеянных полей R_q и T_q . При помощи (171) выразим компоненты T_q :

$$T_q = \mathcal{A} \delta(q + k \sin \phi) + R_q, \quad (177)$$

тогда

$$P_q = \frac{\varkappa}{2\pi} \int dq' \tilde{G}_{qq'} T_{q'} = \frac{\varkappa}{2\pi} \mathcal{A} \tilde{G}_{q,-k \sin \phi} + \frac{\varkappa}{2\pi} \int dq' \tilde{G}_{qq'} R_{q'} \quad (178)$$

и из (172) вытекает следующее интегральное уравнение для функции R_q :

$$R_q + \frac{ik^2 \varkappa}{\sqrt{k^2 - q^2}} \int dq' \tilde{G}_{qq'} R_{q'} = -\frac{ik^2 \varkappa \mathcal{A}}{\sqrt{k^2 - q^2}} \tilde{G}_{q,-k \sin \phi} \quad (179)$$

Чтобы составить себе качественное представление о виде функции R_q можно рассмотреть линейный по \varkappa вклад в решение (179) (слабое рассеяние), который можно получить отбросив интегральный член в левой части (179). Видно, что рассеянное в верхнее полупространство поле определяется экситонной функцией Грина в q -представлении, правый индекс которой равен проекции волнового вектора падающей волны на плоскость слоя.

Расчет нелокальной восприимчивость плоского слоя и угловой зависимости отраженного от него излучения

В этом разделе, используя методику, изложенную выше в разделах диссертационной работы, посвященных расчету спектров поглощения ограниченных экситонных систем, мы рассчитаем входящую в (179) функцию Грина плоского слоя, считая, что возбуждения этого слоя, определяющие его оптическую восприимчивость, представляют собой экситоны Френкеля, построенные по гамильтониану (4). Напомним основные результаты, полученные выше. Рассмотрим решетку двухуровневых молекул¹⁶, в которой начальное расщепление $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ каждой молекулы является заданной функцией её координаты \mathbf{r} . Между молекулами имеется взаимодействие, способное переносить возбуждение с одной молекулы на другую. Гамильтониан такой системы (будучи спроектирован на подпространство, соответствующее наличию только одной возбужденной молекулы, он имеет матрицу (4)) в случае, если $\varepsilon_{\mathbf{r}} = \varepsilon = \text{const}$ может быть диагонализирован переходом к представлению блоховских волн, причем собственные состояния – экситоны Френкеля – и собственные энергии нумеруются квазиимпульсом \mathbf{q} , пробегающим зону Бриллюэна решетки. Собственные энергии такой задачи – $E_{\mathbf{q}}$ – представляют собой (с точностью до сдвига на ε) преобразование Фурье от межмолекулярного взаимодействия. В соответствии с нашей методикой,

¹⁶В рассматриваемом случае это двумерная решетка, фрагмент которой, представляющий собой полосу $|x| < l$, мы предполагаем рассмотреть.

развитой выше, выберем его таким, чтобы функция $E_{\mathbf{q}}$ имела вид:

$$E_{\mathbf{q}} = \varepsilon + \frac{W_0}{1 + q^2 R^2} \quad (180)$$

Второе слагаемое, представляющее собой закон дисперсии свободных экситонов, содержит два параметра – ширину экситонной зоны W_0 и радиус R межмолекулярного взаимодействия. Эффективная масса экситона связана с ними соотношением:

$$m = -\frac{\hbar^2}{2W_0 R^2}$$

Тогда, как было показано выше (см. формулу (139) и относящийся к ней текст), функция (139) $\Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ определенная как:

$$\Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \equiv G_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(E - \varepsilon_{\mathbf{r}}) \quad (181)$$

удовлетворяет следующему уравнению (140):

$$\Delta_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} + \left[\frac{W_0}{E - \varepsilon_{\mathbf{r}}} - 1 \right] \frac{1}{R^2} \Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} = \frac{1}{\rho} \Delta_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{R^2 \rho} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (182)$$

Здесь $\Delta_{\mathbf{r}}$ – двумерный оператор Лапласа действующий на первый индекс функции $\Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$. Нам необходимо найти функцию Грина для плоской полосы, ограниченной в направлении X отрезком $x \in [-l, l]$. В этом случае, в соответствии с развитой в предыдущих разделах методикой, функцию $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ (начальные расщепления) следует взять в виде:

$$\varepsilon_{\mathbf{r}} = \begin{cases} \varepsilon, & \text{если } x \in [-l, l] \\ \infty & \text{если } x \notin [-l, l] \end{cases} \quad (183)$$

Это соответствует ситуации когда область вне полосы заполнена бесконечно отстоящими молекулами, поэтому возбуждение не может выйти за пределы полосы. Проинтегрируем уравнение (182) по y . В силу трансляционной симметрии в направлении Y результат не будет зависеть от y' . Если для интегрированной по y функции Ψ сохранить то же обозначение:

$$\int dy \Psi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'} \rightarrow \Psi_{xx'}, \quad (184)$$

то

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi_{xx'} + \left[\frac{W_0}{E - \varepsilon_x} - 1 \right] \frac{1}{R^2} \Psi_{xx'} = \frac{1}{\rho} \frac{d^2}{dx^2} \delta(x - x') - \frac{1}{\rho R^2} \delta(x - x') \quad (185)$$

Теперь введем новую функцию $S_{xx'}$ следующим образом:

$$S_{xx'} \equiv \Psi_{xx'} - \frac{1}{\rho} \delta(x - x'), \quad (186)$$

Для нее несложно получить уравнение:

$$\frac{d^2}{dx^2} S_{xx'} + \frac{1}{R^2} \left[\frac{W_0}{E - \varepsilon_x} - 1 \right] S_{xx'} = -\frac{1}{\rho R^2} \frac{W_0}{E - \varepsilon_x} \delta(x - x') \quad (187)$$

Проинтегрируем $S_{xx'}$ по второму индексу с экспонентой:

$$\int_{-l}^l dx' S_{xx'} \exp -iq'x' \rightarrow S_x(q') \quad (188)$$

Для определенной таким образом функции $S_x(q')$ получается следующее уравнение:

$$\frac{d^2}{dx^2} S_x + \frac{1}{R^2} \left[\frac{W_0}{E - \varepsilon_x} - 1 \right] S_x = -\frac{1}{\rho R^2} \frac{W_0}{E - \varepsilon} \begin{cases} \exp -iq'x & x \in [-l, l] \\ 0 & x \notin [-l, l] \end{cases} \quad (189)$$

Если теперь проинтегрировать $S_x(q')$ с экспонентой по x и ввести функцию $S_{qq'}$:

$$S_{qq'} \equiv \int_{-l}^l dx S_x(q') \exp iqx, \quad (190)$$

то нетрудно убедиться в том, что входящая в (179) функция $\tilde{G}_{qq'}$ связана с $S_{qq'}$ следующим образом:

$$\tilde{G}_{qq'} = \frac{1}{E - \varepsilon} \left(S_{qq'} + \frac{2}{\rho} \frac{\sin(q - q')l}{q - q'} \right) \quad (191)$$

Умножая уравнение (189) на экспоненту и интегрируя его по частям, получаем:

$$S_{qq'} \left[\underbrace{\frac{1}{R^2} \left(\frac{W_0}{E - \varepsilon} - 1 \right)}_{Q^2} - q^2 \right] = \underbrace{-\frac{2W_0}{\rho R^2 (E - \varepsilon)}}_{2A} \frac{\sin(q - q')l}{q - q'} - \exp(iqx) \left(\frac{dS_x}{dx} - iqS_x \right) \Big|_{-l}^l \quad (192)$$

Для вычисления последнего члена (192) необходимо решить (189) и найти значение $S_x(q')$ и $dS_x(q')/dx$ на краях полосы. Т.е. надо решить следующую задачу:

$$S'' + Q^2 S = A \exp -iq'x \quad \text{при } x \in [-l, l] \quad (193)$$

$$S'' - \frac{1}{R^2} S = 0 \quad \text{при } x \notin [-l, l]$$

Условия непрерывности функции S и ее первой производной при $x = \pm l$ и требования убывания S на $\pm\infty$ (см. текст после формулы (144)) однозначно определяют решение (193).

Не останавливаясь на громоздких вычислениях, приведем окончательный результат:

$$\tilde{G}_{qq'} = \frac{1}{E - \varepsilon} \left\{ \frac{2}{\rho} \frac{\sin(q - q')l}{q - q'} + \frac{2A \sin(q - q')l}{(q - q')(Q^2 - q'^2)} + 2A \mathcal{N} \right\} \quad (194)$$

где

$$\mathcal{N} \equiv \frac{q \cos Ql \sin ql - Q \sin Ql \cos ql}{(Q^2 - q'^2)(Q^2 - q^2)} \frac{\cos q'l - q'R \sin q'l}{\cos Ql - QR \sin Ql} + \quad (195)$$

$$+ \frac{Q \cos Ql \sin ql - q \sin Ql \cos ql}{(Q^2 - q'^2)(Q^2 - q^2)} \frac{\sin q'l + q'R \cos q'l}{\sin Ql + QR \cos Ql}$$

$$A \equiv -\frac{W_0}{\rho R^2 (E - \varepsilon)}$$

$$Q^2 = \frac{1}{R^2} \left(\frac{W_0}{E - \varepsilon} - 1 \right) \quad (196)$$

Прокомментируем формулу (194). Прежде всего отметим, что исследование (194) показывает, что $\tilde{G}_{qq'}$ симметрична по перестановке индексов. Первый член в фигурных скобках не зависит от W_0 и описывает обычную дифракцию на полосе без учета эффектов пространственной дисперсии. Эти эффекты описываются членом $\sim \mathcal{N}$. Особенности (полюса) этого вклада определяются нулями его знаменателя. Видно, что \mathcal{N} наиболее значителен когда оба индекса q и q' близки по модулю к величине Q . Последняя величина имеет смысл модуля волнового вектора экситона, имеющего энергию E – формула (180). Вторым фактором определяющим величину вклада \mathcal{N} является энергетический резонанс¹⁷ связанный с обращением в нуль знаменателей вторых сомножителей слагаемых (195). Все эти особенности попадают в зону свободного экситона $[\varepsilon, \varepsilon + W_0]$ и представляют собой энергии экситона, квантованные в конечной полосе $x \in [-l, l]$. В конце предыдущего пункта было отмечено, что, если правый индекс функции $\tilde{G}_{qq'}$ положить равным x -проекции волнового вектора падающей волны, то $\tilde{G}_{qq'}$, рассматриваемая как функция левого индекса, даст (для случая слабого рассеяния) распределение амплитуд рассеянного излучения. Из (194) видно, что особенности рассеяния наблюдаются когда q^2 и q'^2 близки к друг другу и к Q^2 . Следовательно, если частота падающего света попадает в экситонную зону и такая, что x -проекция q' падающего света близка к волновому вектору резонансного экситона Q

¹⁷т.е. совпадение энергии кванта падающего света $\hbar\omega = E$ с одним из собственных значений энергии экситона, ограниченного полосой $\pm l$

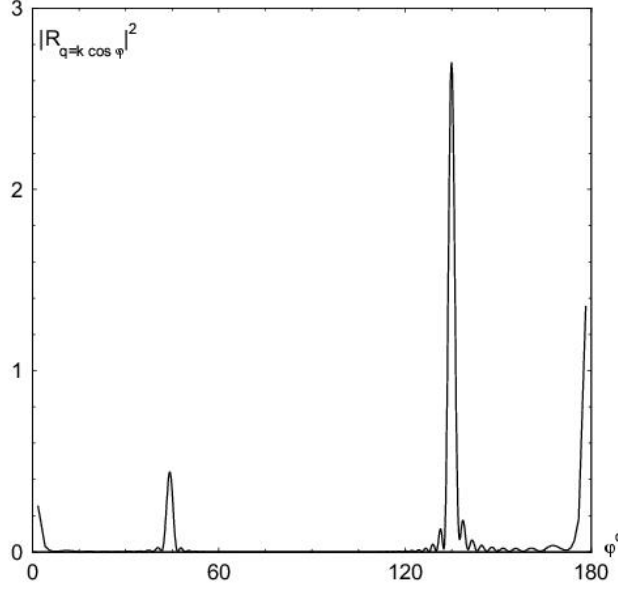


Рис. 10: Угловая зависимость рассеяния в верхнее полупространство плоской полосой с экситоном. Расчет производился для падающей под углом 45^0 плоской монохроматической волны. Наряду с зеркальным отражением под углом 135^0 , возникает рассеяние назад – максимум при углах рассеяния $\sim 45^0$.

(поляритонный резонанс), то в рассеянном свете преобладают пространственные гармоники $q = \pm q'$. Волны с волновым вектором $q = q'$ соответствуют обычному отражению, а волны с $q = -q'$ соответствуют рассеянию назад, которое, в свою очередь, соответствует рассматриваемому эффекту антизеркального отражения.

В качестве примера на рис.10 показан результат численного решения уравнения (179) с функцией Грина (194). Соотношение длины волны λ и полуширины полосы l выбиралось следующим: $2\pi l/\lambda = 100$. Угол падения света на полосу $\phi = 45^0$, энергия фотона $\hbar\omega$ света выбиралась близкой поляритонному резонансу, т.е. такой, что $Q(E = \hbar\omega) \approx \sin \phi 2\pi/\lambda$. Из рис.3 видно, что наряду с обычным отражением под углом 135^0 , имеется добавочный максимум, соответствующий рассеянию назад под углом 45^0 . При отстройке от поляритонного резонанса решение (179) дает только дифракционное рассеяние, с максимумом при 135^0 .

В заключении отметим следующее. Реальные двумерные системы (типа квантовых ям) как правило, неоднородны, что приводит к локализации двумерных экситонов в плоскости

структуры. Локализация связана с *отражением* экситона от неоднородностей, поэтому ей должен сопутствовать описанный выше эффект возникновения обратного рассеяния. Интуитивно представляется правдоподобным, что в этом случае происходит рассеяние назад сходное с рассеянием, возникающим от ограниченной системы, длина которой равна длине локализации экситона в неупорядоченной системе. Подобный эффект рассматривается, например, в [87].

Экспериментально эффект антизеркального отражения был использован при наблюдении замедления свет в брэгговском резонаторе[86], когда механизм образования антизеркальной волны сходен с описанным выше.

Результаты этого раздела диссертации опубликованы в [62].

0.4 РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ. СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ. СТАТИСТИКА ФУНКЦИИ ГРИНА.

В этой и следующих главах диссертационной работы будут приведены результаты автора, касающиеся *разупорядоченных моделей*, описываемых экситонным гамильтонианом с матрицей (4). Все результаты диссертации, касающиеся моделей этого типа, относятся к *одномерным* системам, для которых возможен наиболее глубокий анализ.

Во вводной части диссертации уже было отмечено, что изучение неупорядоченных моделей вызывает наибольшие трудности, поскольку в этом случае все интересующие нас величины, связанные с матрицей (4), зависят от большого числа *различных* диагональных элементов ε_r этой матрицы, и нахождение явного вида этой зависимости для реалистичных с физической точки зрения моделей едва ли возможно. Тем не менее, на данном этапе развития науки о неупорядоченных системах, представляют интерес даже отвлеченные модели, в которых зависимость какой-либо относящейся к модели наблюдаемой величины от параметров беспорядка может быть получена *в явном виде*. В первых разделах этой главы рассматривается такая модель – модель гиперболических дефектов, – для которой методом дифференциального уравнения для функции Грина (изложенным в предыдущей главе) оказывается возможным получить *аналитическое* выражение для спектра поглощения. В этой модели диагональный беспорядок в матрице гамильтониана (4) выбирается в виде набора дефектов некоторого специального вида, при котором форма спектра поглощения оказывается *независящей от взаимного положения дефектов*, а его амплитуда определяется суммой амплитуд дефектов.

В последующих разделах данной главы исследуются классические модели одномерных неупорядоченных систем, когда диагональные элементы ε_r матрицы (4) считаются независимыми случайными величинами с функцией распределения, соответствующей *бинарному* или *равномерному* типам диагонального беспорядка. При этом мы следуем работе Дайсона [24], в которой получено уравнение для *статистики* функции Грина и концентрируем усилия на исследование этого уравнения для указанных двух типов диагонального беспорядка.

Для бинарно разупорядоченной модельной системы в работе показано, что плотность распределения соответствующей функции Грина (эта функция является решением уравнения Дайсона для статистики) имеет *фрактальный* характер (см., например, [92, 93]) и описывается точный алгоритм построения областей где плотность отлична от нуля с указанием значения интеграла от плотности по этим областям. Этот алгоритм позволяет эффективно вычислять усредненную функцию Грина бинарно неупорядоченной модели с возможностью ее аналитического продолжения на область спектра. Приводятся примеры вычисления статистики функции Грина и плотности состояний бинарно неупорядоченной модельной матрицы (4).

Аналогичные исследования равномерно неупорядоченной модели, представленные в заключительных разделах этой главы диссертационной работы, показывают, что статистика функции Грина в этом случае имеет локально аналитический вид. В диссертации показано, что для этой модели на некотором (указанном явно) отрезке решение уравнения Дайсона для статистики функции Грина может быть получено *точно* в аналитическом виде. В дополнительной к этому отрезку области решение может быть получено с помощью предложенной в диссертационной работе эффективной процедуры, причем для усредненной функции Грина получается замкнутое трансцендентное уравнение, а для границ спектра равномерно неупорядоченной системы – аналитическая формула.

Все полученные результаты проверяются сопоставлением с компьютерными экспериментами.

0.4.1 Спектр поглощения одномерной цепочки с экситоном Френкеля при диагональном беспорядке в виде гиперболических дефектов

Постановка задачи и результат

Как уже отмечалось, успехи теории трансляционно-симметричных систем в значительной степени связаны с возможностью использования аппарата функций Блоха. Переход к представлению Блоха позволяет сразу сильно упростить, а иногда и решить самые

разнообразные задачи физики трансляционно-симметричных систем. В теории систем, не имеющих трансляционной симметрии, отсутствует такой универсальный подход, что обуславливает значительные трудности при анализе даже простейших модельных систем такого типа. Одной из таких систем является изучаемая в настоящей диссертационной работе модель экситона Френкеля, представляющая собой совокупность двухуровневых атомов, связанных взаимодействием, способным переносить возбуждение с одного атома на другой. Напомним, что мы рассматриваем только одноэкситонную часть энергетического спектра, соответствующую наличию только одного возбужденного атома, причем рассматриваемые в диссертации модельные задачи соответствуют диагональному типу беспорядка, при котором двухуровневые атомы расположены симметрично, но имеют *различное* расщепление уровней. Как уже говорилось, лишь две задачи такого типа – задача Дайсона [24] и задача Ллойда [16], – допускают точное решение, в связи с чем для анализа таких моделей разрабатывались также приближенные методы (типа метода когерентного потенциала [94, 95, 96, 97, 19]). Критерием качества этих методов, как правило, является сравнение с машинным экспериментом, причем не всегда ясно, почему приближенный расчет согласуется (если согласуется) с численным. Поэтому, с нашей точки зрения, представляют интерес даже отвлеченные модели трансляционно-несимметричных неупорядоченных систем, для которых можно предложить достаточно убедительную с математической точки зрения схему решения. В этом разделе диссертационной работы мы делаем такую попытку. Перейдем к описанию модели.

Рассмотрим задачу об экситоне Френкеля в очень длинной, замкнутой в кольцо цепочке двухуровневых атомов, причем межатомное взаимодействие $w(r)$ и энергия атомного расщепления ε_r в соответствующей матрице (4) берутся в виде (мы несколько изменяем обозначение координат узлов $r \rightarrow z$, поскольку ниже эта переменная будет рассматриваться как комплексная)

$$w(z) = V \exp\left(-\left|\frac{z}{R}\right|\right) \quad (197)$$

$$\varepsilon(z) = \sum_{r=1}^N \frac{c_r}{(z - z_r)} \quad (198)$$

т.е. введен диагональный беспорядок в виде произвольного числа N расположенных в произвольных точках цепочки z_r гиперболических особенностей (ниже *гиперболические дефекты*) с положительными (знакопостоянными) амплитудами c_r . В этом разделе мы

опишем оригинальный метод вычисления спектра поглощения такой цепочки. Как известно, спектр поглощения бездефектной цепочки представляет собой синглет, поэтому изменения спектра поглощения, связанные с дефектами, более заметны, чем изменения плотности состояний. Ниже мы покажем, что наличие гиперболических дефектов приводит к появлению крыла спектра поглощения в экситонной зоне бездефектной цепочки, причем *форма крыла (для описания которой получено аналитическое выражение) не зависит от числа и взаимного расположения дефектов, а величина пропорциональна сумме амплитуд $\sum_{r=1}^N c_r$* , что представляется несколько неожиданным. При расчете используется метод дифференциального уравнения для функции Грина, описанный в предыдущей главе диссертации, а результаты проверяются прямой компьютерной диагонализацией соответствующей матрицы (4).

Схема расчета

Ниже для расчета спектра поглощения описанной выше цепочки мы будем использовать метод дифференциального уравнения для функции Грина, изложенный во второй главе диссертации. Напомним кратко полученные там результаты, поставим задачу для цепочки с параметрами (197) (198) и опишем идею решения. Как было показано ранее, если каждую линию спектра поглощения считать лоренцианом с полушириной δ , то функция $a(\Omega)$ (см. формулы (90) и (101)), определяющая форму спектра поглощения цепочки с параметрами (197), (198) и координатами концов L и $-L$, может быть рассчитана по формуле

$$a(\Omega) = -\rho \operatorname{Im} \int_{-L}^L \frac{\Psi(z) dz}{E - \varepsilon(z)}, \quad (199)$$

где функция Ψ определяется из уравнения

$$\frac{d^2 \Psi}{dz^2} + \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E - \varepsilon(z)} - 1 \right) \Psi = -\frac{1}{R^2} \quad (200)$$

Здесь R – радиус взаимодействия (197), $W = 2\rho V R$ – ширина экситонной зоны бездефектной цепочки, ρ – плотность атомов в цепочке, $\varepsilon(z)$ – рельеф атомного расщепления, Ω – энергия кванта падающего света, $E = \Omega + i\delta, \delta > 0$. Для замкнутой в кольцо цепочки, которую мы рассматриваем, функция $\Psi(z)$ должна удовлетворять условиям цикличности

$$\Psi(L) = \Psi(-L) \quad (201)$$

$$d\Psi(L)/dz = d\Psi(-L)/dz \quad (202)$$

Интегрируя уравнение (200) от $-L$ до L и принимая во внимание (201) и (202), можно убедиться в том, что интеграл в (199) может быть выражен следующим образом:

$$2VR\rho \int_{-L}^L \frac{\Psi(z)dz}{E - \varepsilon(z)} = \int_{-L}^L [\Psi(z) - 1]dz \quad (203)$$

Таким образом, задача сводится к вычислению интеграла $\int_{-L}^L \Psi(z)dz$. Идея заключается в том, чтобы вычислять этот интеграл не по вещественной оси, а по полукругу радиуса L в верхней полуплоскости комплексного переменного z . Это можно сделать в том случае, если $\Psi(z)$ не имеет особенностей в верхней полуплоскости (полюсов, точек ветвления), за чем необходимо проследить. Далее, если $\varepsilon(z)$ убывает на указанном полукруге, то уравнение (200) может быть решено на полукруге по теории возмущений тем более точно, чем больше радиус полукруга (длина цепочки), и при $L \rightarrow \infty$ ошибка будет стремиться к нулю. Известно [27], что решение уравнения (200) не будет иметь особенностей в верхней полуплоскости комплексного z в том случае, если функция $W/(E - \varepsilon(z))$ там однозначна и не имеет полюсов. Покажем, что это так для $\varepsilon(z)$ вида (198) в случае когда E имеет малую положительную мнимую часть. Если E вещественна, то уравнение $E - \varepsilon(z) = 0$ имеет N вещественных корней $z_k(E), k = 1, \dots, N$. Если E получает малую мнимую добавку $i\delta, \delta > 0$, корни получают приращение

$$\delta z_k = \frac{i\delta}{d\varepsilon(z_k)/dz} \quad (204)$$

Так как $\varepsilon(z)$ из формулы (198) – монотонно убывающая функция, все указанные корни сдвинутся в нижнюю полуплоскость и, следовательно, $W/(E - \varepsilon(z))$ в нашем случае не имеет полюсов в верхней полуплоскости. В следующем разделе мы проведем расчет спектра по описанной выше схеме.

Расчет спектра

Перепишем уравнение (200) в виде:

$$\Psi'' + q^2\Psi + \Delta(z)\Psi = -\frac{1}{R^2} \quad (205)$$

где

$$q^2 \equiv \frac{1}{R^2} \left(\frac{W}{E} - 1 \right) \quad (206)$$

$$\Delta(z) \equiv \frac{1}{R^2} \frac{W\varepsilon(z)}{[E - \varepsilon(z)]E} \quad (207)$$

Здесь q – волновой вектор экситона с энергией E в бездефектной цепочке, функция $\Delta(z)$ описывает дефекты и убывает на полукруге радиуса L (ниже мы будем называть его *большим полукругом*) в верхней полуплоскости комплексного z . Найдем решение (205) на большом полукруге в первом приближении по $\Delta(z)$. Ищем решение (205) в виде $\Psi(z) = \Psi_0(z) + \Psi_1(z) + \dots$, где нижний индекс указывает порядок поправки по $\Delta(z)$. Эти поправки удовлетворяют уравнениям

$$\Psi_0'' + q^2\Psi_0 = -\frac{1}{R^2} \quad (208)$$

$$\Psi_1'' + q^2\Psi_1 = -\Psi_0\Delta \quad \text{и т.д.} \quad (209)$$

Решение каждого из этих уравнений не вызывает затруднений, и $\Psi(z)$ в рассматриваемом приближении имеет вид

$$\begin{aligned} \Psi(z) = & -\frac{1}{q^2R^2} + \frac{1}{q^2R^2} \int_L^z \frac{\Delta(\xi)}{q} \sin[q(z - \xi)]d\xi + \\ & + C_+ \left(e^{iqz} - \int_L^z \frac{\Delta(\xi)}{q} e^{iq\xi} \sin[q(z - \xi)]d\xi \right) + \\ & + C_- \left(e^{-iqz} - \int_L^z \frac{\Delta(\xi)}{q} e^{-iq\xi} \sin[q(z - \xi)]d\xi \right). \end{aligned} \quad (210)$$

Все интегрирования идут от правого конца цепочки по большому полукругу, и, т.к. $\Delta(z)$ там мало (при $L \rightarrow \infty$), мы ожидаем, что решение (210) на большом полукруге практически совпадает с точным. Для определения констант C_{\pm} используем полученное решение (210) и условия (201) и (202), что возможно, т.к. точки $\pm L$ лежат на большом полукруге, где полученное решение справедливо. В результате имеем следующую систему уравнений для C_+ и C_- :

$$C_+ \{I_c(q, q) - 2q \sin(qL)\} + C_- \{I_c(-q, q) - 2q \sin(qL)\} = \frac{I_c(0, q)}{R^2 q^2} \quad (211)$$

$$C_+ \{iI_s(q, q) - 2q \sin(qL)\} + C_- \{iI_s(-q, q) + 2q \sin(qL)\} = i \frac{I_s(0, q)}{R^2 q^2} \quad (212)$$

где

$$I_c(\alpha, \beta) \equiv \int_{-L}^L \Delta(\xi) e^{i\alpha\xi} \cos[(L + \xi)\beta] d\xi \quad (213)$$

$$I_s(\alpha, \beta) \equiv - \int_{-L}^L \Delta(\xi) e^{i\alpha\xi} \sin[(L + \xi)\beta] d\xi \quad (214)$$

Напомним, что все интегрирования ведутся по большому полуокругу. Будем считать q вещественным¹⁸ и положительным. Это означает, что *энергия E попадает в экситонную зону бездефектной решетки*. Займемся вычислением интегралов (213) и (214), входящих в (211) и (212). При этом мы будем всюду, где это возможно, переходить к пределу $L \rightarrow \infty$. Поясним, например, как вычисляется

$$I_s(0, q) = - \int_{-L}^L d\xi \Delta(\xi) \sin[q(L + \xi)]. \quad (215)$$

На большом полуокруге в синусе следует оставить только растущую экспоненту $\exp[-iq(L + \xi)]$. В то же время эта экспонента стремится к нулю на нижнем большом полуокруге, поэтому интеграл

$$\int_{-L}^L \Delta(\xi) \exp[-iq(L + \xi)] d\xi \quad (216)$$

можно вычислять по всему большому кругу, что нетрудно сделать по вычетам. Приведем результаты вычисления интегралов, входящих в (211) и (212):

$$I_s(0, q) = \pi \exp^{-iqL} \sum_{\xi} \text{Res}[\Delta(\xi) e^{-iq\xi}], \quad (217)$$

$$I_s(q, q) = \frac{e^{-iqL}}{2i} \int_{-L}^L \Delta(\xi) d\xi, \quad (218)$$

$$I_c(0, q) = \pi i \exp^{-iqL} \sum_{\xi} \text{Res}[\Delta(\xi) e^{-iq\xi}], \quad (219)$$

$$I_s(q, q) = \frac{e^{-iqL}}{2} \int_{-L}^L \Delta(\xi) d\xi. \quad (220)$$

Так как $I_c(0, q) = iI_s(0, q)$ и $iI_s(q, q) = I_c(q, q)$, то $C_- = 0$ и остальные интегралы из (211) и (212) нам не понадобятся. Для C_+ получаем следующую формулу:

$$C_+ = \left(\frac{1}{Rq} \right)^2 \frac{2\pi i e^{-iqL} \sum_{\xi} \text{Res}[\Delta(\xi) e^{-iq\xi}]}{e^{-iqL} \int_{-L}^L \Delta(\xi) d\xi - 4q \sin(qL)} \quad (221)$$

Для окончательного вычисления $\int_{-L}^L (\Psi(z) - 1) dz$ нам потребуются еще интегралы (см. формулу (210))

$$\int_L^{-L} dz \int_L^z d\xi \Delta(\xi) \sin[q(z - \xi)] = -\frac{i\pi}{q} e^{-iqL} \sum_{\xi} \text{Res}[\Delta(\xi) e^{-iq\xi}] + \frac{1}{q} \int_L^{-L} \Delta(\xi) d\xi, \quad (222)$$

$$\int_L^{-L} dz \int_L^z d\xi \Delta(\xi) e^{iq\xi} \sin[q(z - \xi)] = -\frac{e^{-iqL}}{2q} \int_L^{-L} \Delta(\xi) d\xi$$

¹⁸С точностью до малой мнимой добавки, связанной с добавкой $i\delta$ к энергии E .

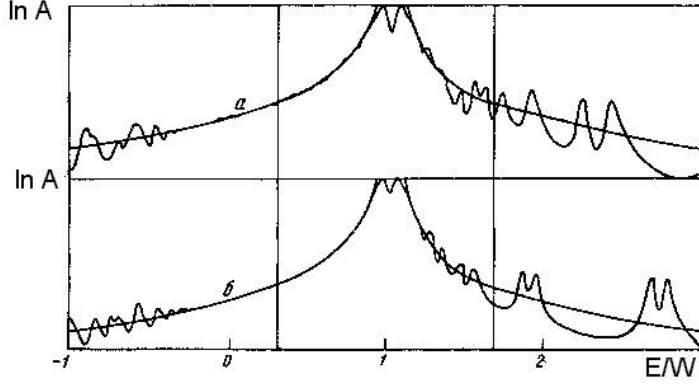


Рис. 11: Логарифмические спектры поглощения двух цепочек с различным количеством, расположением и амплитудой гиперболических дефектов при $W = 1, \rho = 1, \delta = 0.02, R = 2$. Полное число узлов в цепочке во всех случаях 600 (т.е. $2L = 600$). На кривой *a* изображен логарифмический спектр поглощения цепочки с пятью гиперболическими дефектами. Их положения (номера узлов, на которых атомное расщепление обращается в бесконечность, т.е. эти атомы эффективно отсутствуют) таковы: 200, 250, 300, 350, 400. Амплитуды дефектов – соответственно 2, 3, 3, 6, 1. На графике *b* приведен спектр цепочки с двумя дефектами, с равными 5 амплитудами и приходящимися на узлы 250 и 350. Для каждого численного расчета приведен спектр, рассчитанный по формуле (223) (гладкие кривые), причем никакой подгонки (ни по амплитуде, ни по форме) не делалось.

Эти выражения получаются разложением синуса на экспоненты, интегрированием по частям, сохранением только растущих на большом полуокружье экспонент и переходом к интегрированию по большому кругу, как при получении выражений (217) – (220). Принимая во внимание, что

$$\int_L^{-L} \frac{\varepsilon(z)dz}{E - \varepsilon(z)} = \frac{i\pi}{E} \sum_r c_r$$

(интегрирование идет по большому полуокружью), уже нетрудно получить для спектра поглощения следующую окончательную формулу:

$$a(\Omega) = -\text{Im} \left(\frac{2L\rho}{E - W} - i\pi\rho \left(\frac{1}{E - W} \right)^2 \sum_r c_r \right), \quad E = \Omega + i\delta \quad (223)$$

Обсуждение

Первое слагаемое в (223) дает синглет и не зависит от наличия дефектов. Второе слагаемое дает крыло в экситонной зоне, причем несколько неожиданным представляется независимость его формы от взаимного расположения z_r дефектов. Что касается амплитуды крыла, то она оказывается пропорциональной сумме амплитуд дефектов. Приведенный расчет имеет физический уровень строгости. Для строгого расчета следует написать весь ряд теории возмущений по $\Delta(z)$ для решения уравнения (200) и убедиться в том, что влияние всех членов этого ряда, кроме рассмотренного выше члена первого порядка, на большом полукруге стремиться к нулю при $L \rightarrow \infty$. Это было проделано, причем оказалось, что результат (223) является верным только при вещественном q , т.е. при энергии, попадающей в экситонную зону бездефектной цепочки. В противном случае вкладом членов порядка выше первого пренебречь нельзя. Такое поведение следует обсудить. Как было показано в предыдущей главе диссертационной работы, функция $\Psi(z)$ связана с функцией Грина матрицы гамильтониана (4) (см. формулу (93)), где диагональные элементы берутся в форме (198). Следовательно, решение (223) можно было бы аналитически продолжить в область энергий, не попадающих в экситонную зону бездефектной цепочки. Это было бы совершенно корректно, если бы мы имели дело с точной функцией Грина, однако уравнение (200) было получено выше в *континуальном* приближении, поэтому (223) может давать заметные отклонения от точного спектра вне экситонной зоны, где проведенный в предыдущем разделе расчет не является строгим. Проведенный компьютерный анализ подтверждает это замечание. На рис.11 приведены логарифмические спектры поглощения двух цепочек с различным количеством, расположением и амплитудой гиперболических дефектов при $W = 1, \rho = 1, \delta = 0.02, R = 2$. Полное число узлов в цепочке во всех случаях 600 (т.е. $2L = 600$). На верхней кривой *a* изображен логарифмический спектр поглощения цепочки с пятью гиперболическими дефектами. Их положения (номера узлов, на которых атомное расщепление обращается в бесконечность, т.е. эти атомы эффективно отсутствуют) таковы: 200, 250, 300, 350, 400. Амплитуды дефектов – соответственно 2, 3, 3, 6, 1. На нижнем графике *b* приведен спектр цепочки с двумя дефектами, с равными 5 амплитудами и приходящимися на узлы 250 и 350. Для каждого численного расчета приведен спектр, рассчитанный по формуле (223) (гладкие кривые), причем никакой подгонки (ни

по амплитуде, ни по форме) не делалось. Энергия отложена в единицах W . Из рисунка видно, что при $0 < \Omega < 1$ (экситонная зона) численные спектры практически полностью совпадают с теоретическими, причем форма спектров не зависит от величины и расположения дефектов. Расхождение при $\Omega \approx 1$ объясняется конечностью цепочки, т.к. в этой области энергий величина q^2 ($q^2 \approx 0$) может быть сравнима с $\Delta(z)$, которая конечна на большом круге вследствие конечности цепочки. Вне экситонной зоны можно говорить лишь о согласии "в среднем" (его можно существенно улучшить, увеличив мнимую часть энергии δ). В этой области спектр зависит от расположения и величины дефектов.

Рассмотренная выше модель разупорядоченной системы с гиперболическими дефектами может показаться чрезмерно отвлеченной – трудно представить себе реальную систему с энергетическим рельефом хотя бы качественно близким к рассмотренному выше. Тем не менее, на наш взгляд, модель гиперболических дефектов может оказаться поучительной по следующей причине.

Как известно, в квантовой механике для решения уравнения Шредингера, имеющего вид сходный с (205), в некоторых случаях применимо квазиклассическое приближение. При этом оказывается возможным написать явное (приближенное) выражение для волновой функции – так называемое, адиабатическое решение. Тем же способом можно находить приближенное решение и уравнения (205) для широкого класса энергетических рельефов $\varepsilon(z)$ (см. выражение (207)). Как показывает дополнительное исследование, приведенный в этом разделе диссертации анализ как раз и соответствует применению адиабатического выражения для решения (205) на большом круге. В рассмотренном частном случае гиперболических дефектов это позволяет получить точный (в пределе $L \rightarrow \infty$) ответ. В случае же произвольной (достаточно гладкой) функции $\varepsilon(z)$ рассмотренная в этом разделе модельная задача дает все основания полагать, что адиабатическое решение даст хорошее приближение для спектра поглощения. По этому предложенный подход, возможно, удастся применить к более реалистическим моделям дефектных цепочек. Результаты этого раздела диссертации опубликованы в [63].

0.4.2 Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы с бинарным или равномерным диагональным беспорядком

Постановка задачи и основные результаты

В нижеследующих разделах настоящей главы диссертационной работы мы опишем результаты, полученные автором для модели одномерного экситона Френкеля при бинарном и равномерном диагональном беспорядках в приближении ближайшего соседа. Приведем полную постановку задачи, рассматриваемой ниже.

Рассмотрим цепочку двухуровневых атомов, в которой расщепление $\varepsilon(r)$ уровней атома с номером r может быть с вероятностью c равно u и с вероятностью $1 - c$ равно $-u$ (бинарный беспорядок) или равномерно распределено в интервале $[-u, u]$ (равномерный беспорядок). Между атомами имеется взаимодействие Δ , способное переносить возбуждение с одного атома на другой, причем это взаимодействие отлично от нуля только для ближайших соседей. Таким образом, задача сводится к исследованию случайных матриц типа (4), являющихся центральным объектом в данной диссертационной работе. Если число атомов в цепочке N , то гамильтониан \mathbf{H} (4) имеет в данном случае следующие элементы:

$$H_{r,r'} = \varepsilon(r)\delta_{r,r'} + \Delta(\delta_{r,r'-1} + \delta_{r,r'+1}), \quad r, r' = 1, 2, \dots, N. \quad (224)$$

Как уже отмечалось, *любая* нетривиальная и достаточно достоверная информация о спектре и собственных векторах этой матрицы, представляется ценной. Обычно изучается плотность состояний этой матрицы, в которой диагональные элементы $\varepsilon(r)$ считаются независимыми случайными величинами, имеющими функцию распределения $P(\varepsilon)$. Для бинарного и равномерного беспорядков эта функция имеет соответственно вид:

$$P(\varepsilon) = c \delta(\varepsilon - u) + (1 - c) \delta(\varepsilon + u) \quad (\text{бинарный беспорядок}) \quad (225)$$

$$P(\varepsilon) = \begin{cases} 1/2u & \varepsilon \in [-u, u] \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (\text{равномерный беспорядок})$$

Как правило, эту задачу рассматривают в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$. Заметим здесь, что задача, соответствующая бинарному беспорядку, возникает при рассмотрении

колебательного спектра изотопически разупорядоченной цепочки, причем существует реальная физическая система [29, 30], описываемая этой моделью. Задачи этого типа рассматривались Дайсоном [24], которому удалось получить точное решение для некоторого специального вида недиагонального беспорядка. Для диагонально неупорядоченных моделей Дайсону не удалось получить точных решений, но *подход*, предложенный Дайсоном, представляется эффективным и для задач этого типа и мы применяем его к случайным матрицам (224) с бинарным и равномерным беспорядками (225).

Всюду ниже мы будем исследовать функцию Грина, построенную по гамильтониану (224):

$$\mathbf{G} = (E - \mathbf{H})^{-1} \quad (226)$$

Из всей матрицы функции Грина (226) для рассматриваемых задач оказывается особенно важным элемент $G_{N,N}$, который мы будем ниже называть *краевой функцией Грина* (КФГ). Для расчета плотности состояний необходима *объемная функция Грина* – достаточно произвольный диагональный элемент $G_{r,r}$, такой, что узел r находится настолько далеко от краев цепочки, что среднее $\langle G_{r,r} \rangle \equiv \langle g(E) \rangle$ не зависит от номера r .

Напомним, что КФГ обладает следующим свойством (см. формулу (60) в обзорной части диссертационной работы). Рассмотрим цепочку из N атомов, КФГ которой обозначим γ и добавим к ней еще один атом с расщеплением ε . КФГ полученной таким образом цепочки из $N + 1$ -го атома обозначим $\tilde{\gamma}$. Тогда имеет место следующее соотношение¹⁹:

$$\tilde{\gamma} = \frac{1}{E - \varepsilon - \Delta^2 \gamma} \quad (227)$$

КФГ γ является случайной величиной и если известна функция распределения $\rho_N(\gamma)$ КФГ для цепочки из N атомов, то функция распределения $\rho_{N+1}(\tilde{\gamma})$ для цепочки из $N + 1$ атомов может быть получена при помощи (227). При $N \rightarrow \infty$ эти функции должны совпадать $\rho_N(\gamma) = \rho_{N+1}(\tilde{\gamma}) \equiv \rho(\gamma)$, что дает следующее уравнение для предельной функции $\rho(\gamma)$ (см. формулу (62)):

$$\rho(\gamma)\gamma^2 = \int d\gamma' P\left(E - \Delta^2 \gamma' - \frac{1}{\gamma}\right) \rho(\gamma') \quad (228)$$

Решение этого уравнения в ряде случаев может быть существенно нерегулярной функцией, на что было указано в [28]. Ниже мы увидим, что для случая бинарного беспорядка

¹⁹По сравнению с формулой (60) здесь произведена замена обозначений $w \rightarrow \Delta$

это действительно так, в отличии от случая равномерного беспорядка, когда решение (228) представляет собой достаточно "хорошую" (но не аналитическую) функцию.²⁰ Исследование КФГ представляет интерес, главным образом, потому, что, зная функцию распределения КФГ $\rho(\gamma)$, можно вычислить усредненную объемную функцию Грина g по любой из следующих формул [19]:

$$\langle g(E) \rangle = \int \frac{dx dy d\varepsilon}{E - \varepsilon - \Delta^2(x + y)} \rho(x) \rho(y) P(\varepsilon) \quad (229)$$

$$\langle g(E) \rangle = \frac{d}{dE} \int d\gamma d\varepsilon \rho(\gamma) P(\varepsilon) \ln(E - \varepsilon - \gamma \Delta^2) \quad (229')$$

Для случая бинарного или равномерного беспорядков (225), уравнение (228) имеет соответственно вид:

$$\rho(\gamma) \gamma^2 \Delta^2 = c \rho\left(\frac{E - u - 1/\gamma}{\Delta^2}\right) + (1 - c) \rho\left(\frac{E + u - 1/\gamma}{\Delta^2}\right) \quad (\text{бинарный беспорядок}) \quad (230)$$

$$2u\gamma^2 \rho(\gamma) = \int_{l(\gamma)}^{h(\gamma)} \rho(x) dx, \quad h(l)(\gamma) \equiv \frac{E + (-)u - 1/\gamma}{\Delta^2} \quad (\text{равномерный беспорядок}) \quad (230')$$

Ниже перечислены полученные в этом разделе диссертационной работы результаты, относящиеся к исследованию этих уравнений.

Для бинарного беспорядка:

1. Показано, что функция $\rho(\gamma)$ не аналитична по γ и при $E > E_c(u)$ (формула для вычисления $E_c(u)$ приведена) обращается в нуль в области числовой оси, представляющей собой совокупность бесконечного числа *запрещенных* отрезков, разделенных интервалами. При $E < E_c$ все эти интервалы (кроме правого и левого полубесконечных) обращаются в нуль и $\rho(\gamma)$ становится отличной от нуля всюду внутри некоторого (указанного явно) отрезка.

2. Для случая $E > E_c$ указан алгоритм построения запрещенных отрезков, представляющий собой последовательность этапов. На первом этапе определяется область R_1 , в которой $\rho(\gamma)$ заведомо равна нулю. На втором этапе в дополнительной к R_1 области указывается область R_2 , где $\rho(\gamma)$ также обращается в нуль. На третьем этапе в области, дополнительной к $R_1 \cup R_2$, определяется область, где $\rho(\gamma) \equiv 0$ и т.д.

²⁰Напомним, что для случая модели Ллойда уравнение (228) (или (62)) имеет решением лоренциан (см. формулы (81) – (87)) – аналитическую функцию.

3. Каждый этап характеризуется появлением некоторого числа неперекрывающихся областей, в которых $\rho(\gamma)$ не всюду равна нулю. На каждом этапе определяются границы этих областей, а также интегралы от функции $\rho(\gamma)$ по каждой из них. Таким образом, после каждого этапа имеется возможность приближенного расчета средних с функцией $\rho(\gamma)$ путем замены ее в указанных областях на постоянную. От этапа к этапу точность вычисления средних возрастает.

4. Предлагаемый алгоритм построения $\rho(\gamma)$ позволяет вычислять средние с возможностью их аналитического продолжения по E в область $E < E_c$ и в область спектра гамильтониана (224). Вычислены $\text{Im}\langle\gamma(E)\rangle$ (плотность возбуждений на краю цепочки) и $\text{Im}\langle g(E)\rangle$ (плотность состояний), в согласии с результатами, полученными компьютерной диагонализацией.

Для равномерного беспорядка:

1. Показано, что на некотором (указанном явно) отрезке F функция $\rho(\gamma)$ находится *точно* и определяется формулой: $\rho(\gamma) = 1/2u\gamma^2$.

2. Указаны отображения \hat{O}_\pm , которыми отрезок F переводится в два других F'_\pm , на которых $\rho(\gamma)$ определяется с точностью до одной константы. Каждый отрезок F'_\pm отображениями \hat{O}_\pm переводится в два следующих, на каждом из которых $\rho(\gamma)$ вычисляется с точностью до двух констант и т.д.

3. Предложен метод построения $\rho(\gamma)$ во всей области определения, который хорошо согласуется с компьютерными расчетами $\rho(\gamma)$. В рамках предложенного метода для усредненной КФГ получено простое замкнутое трансцендентное уравнение, а для границ спектра гамильтониана (224) – аналитическая формула. Вычисленные усредненная КФГ и границы спектра хорошо согласуются с результатами, полученными компьютерной диагонализацией и усреднением.

Бинарный беспорядок. Построение функции распределения КФГ

КФГ представляет собой случайную величину, значения которой можно получать следующим образом. Возьмем произвольную цепочку, КФГ которой равна γ_0 , и будем добавлять к ней атомы со случайным расщеплением ε . При этом изменение КФГ можно представить

как последовательность отображений (227)

$$\gamma_{n+1} = \frac{1}{E - \varepsilon - \Delta^2 \gamma_n} \quad (231)$$

со случайным параметром ε . При бесконечном повторении этого отображения величины γ_n распределяются в соответствии с искомой функцией распределения $\rho(\gamma)$. Если бы параметр ε не флуктуировал, а был бы равен u ($-u$), то отображение (231) быстро сошлось бы к величинам γ_- (γ_+), определяемым уравнением:

$$\gamma_{\pm} = \frac{1}{E \pm u - \Delta^2 \gamma_{\pm}} \quad (232)$$

$$\gamma_{\pm} = \frac{E \pm u - \sqrt{(E \pm u)^2 - 4\Delta^2}}{2\Delta^2} \quad (233)$$

Нетрудно показать (графически, как это обычно делается при изучении аттракторов отображений типа (231)), что, если при каком-то n γ_n оказалась заключенной между γ_- и γ_+ , то γ_{n+1} оказывается также заключенной в этом интервале, если $-u < \varepsilon < u$. Так как γ_n рано или поздно всегда попадет в интервал $[\gamma_+, \gamma_-]$, то и все следующие $\gamma_m, m > n$ также попадут в этот интервал. Отсюда можно сделать вывод, что функция $\rho(\gamma)$ не равна нулю только в этом интервале.

$$\rho(\gamma) \neq 0 \quad \text{при} \quad \gamma \in [\gamma_+, \gamma_-] \quad (234)$$

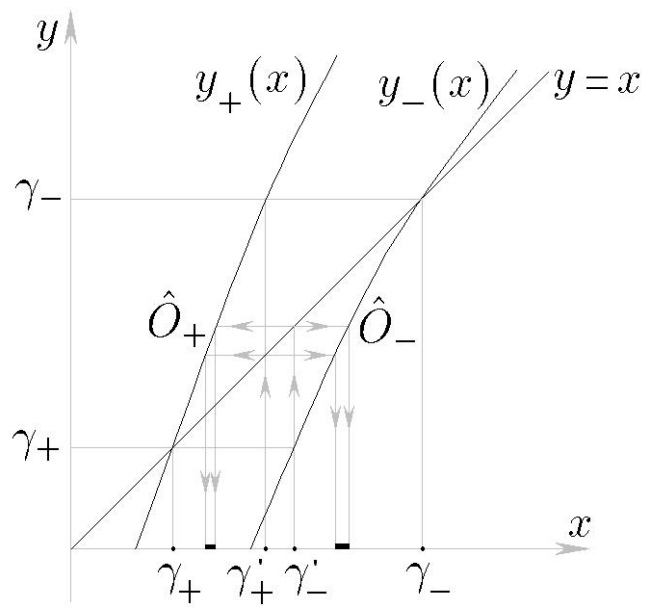
Все, сказанное выше, в равной степени справедливо для бинарного и равномерного беспорядков. Специфика бинарного беспорядка заключается в том, что внутри области $[\gamma_+, \gamma_-]$ можно указать область, где $\rho(\gamma) \equiv 0$, следующим образом. На рис.12 на плоскости xy приведены графики зависимостей

$$y_{\pm}(x) = \frac{E \pm u - 1/x}{\Delta^2}, \quad (235)$$

представляющие собой аргументы функций ρ в правой части (230) (верхняя строчка), а также прямая $y = x$. Определим γ'_{\pm} из уравнений

$$y_{\pm}(\gamma'_{\pm}) = \gamma_{\mp} \quad (236)$$

и построим соответствующие точки так, как это показано на рис.12. Видно, что, если $\gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]$, то $y_-(\gamma) < \gamma_+$ и $y_+(\gamma) > \gamma_-$, т.е. аргументы функций ρ в правой части (230)



$$y_{\pm}(x) = \frac{E \pm u - 1/x}{\Delta^2}$$

Рис. 12: Пояснения в тексте

не принадлежат $[\gamma_+, \gamma_-]$, правая часть (230) обращается в нуль и, следовательно:

$$\rho(\gamma) \equiv 0 \quad \text{при } \gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-] \quad (237)$$

При этом $\rho(\gamma)$, во всяком случае, не всюду равна нулю при $\gamma \in [\gamma'_\pm, \gamma_\pm]$.

Проинтегрируем теперь уравнение (230), например, по промежутку $[\gamma_+, \gamma'_+]$. Имеем:

$$\int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x) dx = \frac{(1-c)}{\Delta^2} \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho \left(\frac{E+u-1/x}{\Delta^2} \right) \frac{dx}{x^2} = (1-c) \int_{\gamma_+}^{\gamma_-} \rho(x) dx = 1-c \quad (238)$$

Здесь мы воспользовались тем, что аргумент $y_-(\gamma)$ первой функции в правой части (230) не принадлежит $[\gamma_+, \gamma_-]$ при $\gamma \in [\gamma_+, \gamma'_+]$ и, следовательно, интеграл от первой функции равен нулю. Аналогично получается

$$\int_{\gamma'_-}^{\gamma_-} \rho(x) dx = c \quad (239)$$

Таким образом, на этом этапе мы можем искомую функцию распределения $\rho(\gamma)$ приближенно представить в виде:

$$\rho(\gamma) \approx \begin{cases} c/(\gamma_- - \gamma'_-) & \gamma \in [\gamma_-, \gamma'_-] \\ (1-c)/(\gamma'_+ - \gamma_+) & \gamma \in [\gamma_+, \gamma'_+] \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (240)$$

Для дальнейшего удобно ввести понятия двух видов *отображений* \hat{O}_\pm точек или отрезков следующим образом. Будем считать, что $x' = \hat{O}_\pm x$ если $y_\pm(x') = x$. Например, $\hat{O}_+ \gamma_- = \gamma'_+$ или $\hat{O}_- \gamma_+ = \gamma'_-$ (рис.12). Аналогично для отрезков. Если отрезок представлять столбцом, верхний и нижний элементы которого суть верхняя и нижняя границы этого отрезка то:

$$\hat{O}_\pm \begin{pmatrix} h \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{O}_\pm h \\ \hat{O}_\pm l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/(E \pm u - \Delta^2 h) \\ 1/(E \pm u - \Delta^2 l) \end{pmatrix} \quad (241)$$

Рассуждения, аналогичные приведенным выше для получения условия (237), приводят к следующему утверждению: *если $\rho(\gamma)$, определяемая уравнением (230), обращается в нуль на некотором отрезке $[a, b]$, то она равна нулю также и на двух отрезках, полученных из $[a, b]$ отображениями \hat{O}_\pm* . Например, равенство нулю $\rho(\gamma)$ на $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ приводит к равенству нулю $\rho(\gamma)$ на отрезках, полученных из него отображениями \hat{O}_\pm . На рис.12 эти отрезки показаны жирными черными чертами, там же стрелками показан графический смысл отображений \hat{O}_\pm . Таким образом, применяя отображения \hat{O}_\pm n раз или проходя

n этапов, из отрезка $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ мы получим 2^n других, где $\rho(\gamma) \equiv 0$. Назовем эти отрезки *запрещенными* (всего запрещенных отрезков после n этапов будет $2^n + 1$).

Наряду с запрещенными отрезками, где $\rho(\gamma) \equiv 0$, возникают дополнительные к ним *разрешенные отрезки*, внутри которых $\rho(\gamma)$ не всюду равна нулю. После n этапов, мы получим 2^{n+1} разрешенных отрезков (рис.12). Будем характеризовать каждый разрешенный отрезок на n -ом этапе столбцом, первый и второй элементы которого суть верхняя и нижняя границы разрешенного отрезка, а третий элемент – интеграл от функции $\rho(\gamma)$ по этому разрешенному отрезку.

Пусть пройдено n этапов и имеется 2^{n+1} разрешенных отрезков:

$$\begin{pmatrix} h_i \\ l_i \\ I_i \end{pmatrix} \quad i = 1, \dots, 2^{n+1} \quad (242)$$

Тогда нетрудно проверить, что $n + 1$ этап заключается в том, что из этой совокупности разрешенных отрезков получается новая совокупность, состоящая из следующих двух классов. Первый класс получается применением отображения \hat{O}_+ к двум верхним компонентам столбцов совокупности (242) и умножением на $1 - c$ третьего компонента, второй – применением отображения \hat{O}_- к двум верхним компонентам столбцов совокупности (242) и умножением на c третьего компонента:

$$\begin{pmatrix} \tilde{h}_i \\ \tilde{l}_i \\ \tilde{I}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{O}_+ h_i \\ \hat{O}_+ l_i \\ (1 - c)I_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/(E + u - \Delta^2 h_i) \\ 1/(E + u - \Delta^2 l_i) \\ (1 - c)I_i \end{pmatrix} \quad i = 1, \dots, 2^{n+1} \quad (243)$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{h}_{i+2^{n+1}} \\ \tilde{l}_{i+2^{n+1}} \\ \tilde{I}_{i+2^{n+1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{O}_- h_i \\ \hat{O}_- l_i \\ cI_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/(E - u - \Delta^2 h_i) \\ 1/(E - u - \Delta^2 l_i) \\ cI_i \end{pmatrix} \quad i = 1, \dots, 2^{n+1} \quad (244)$$

Проверка выполняется по аналогии с формулами (238),(239). Аналогично (240), после n этапов функцию $\rho(\gamma)$ можно приближенно считать постоянной на отрезках $[l_i, h_i]$ и равной $I_i/(h_i - l_i)$:

$$\rho(\gamma) = I_i/(h_i - l_i) \quad \text{при} \quad \gamma \in [l_i, h_i] \quad (245)$$

Алгоритм (243),(244),(245) в сочетании с начальным условием

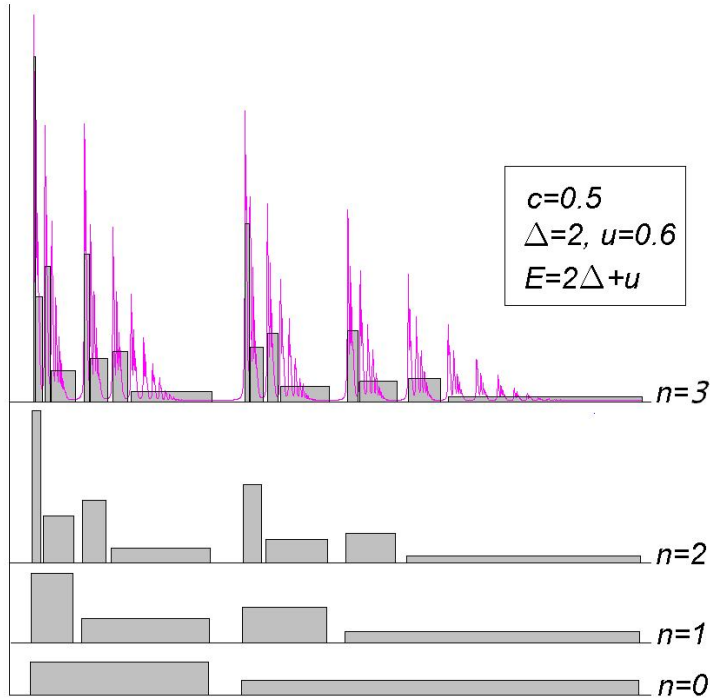


Рис. 13: Построение функции $\rho(\gamma)$ при помощи алгоритма (243)(244)(245) в n этапов ($n = 0, 1, 2, 3$). На верхнем рисунке ($n = 3$) показана функция $\rho(\gamma)$, полученная компьютерным моделированием.

$$\begin{pmatrix} h_1 \\ l_1 \\ I_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma'_+ \\ \gamma_+ \\ 1 - c \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} h_2 \\ l_2 \\ I_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_- \\ \gamma'_- \\ c \end{pmatrix} \quad (246)$$

позволяет строить функцию распределения $\rho(\gamma)$ с произвольной точностью. Пример такого построения показан на рис.13, где также показана функция $\rho(\gamma)$, полученная компьютерным моделированием.

Описанная выше процедура последовательного дробления разрешенных отрезков напоминает процедуру построения фрактала. Функцию $\rho(\gamma)$ можно рассматривать как "аттрактор" случайного отображения (231). На рис.14 показана структура этого "аттрактора" полученная следующим образом. К "затравочному" $\gamma_0 = 0.5(\gamma_+(E_0) + \gamma_-(E_0))$ ($E_0 \equiv 2\Delta + u$) 50000 раз применялось отображение (231), причем параметр ε генерировался случайным образом в соответствии с распределением (225) (при $c = 0.7$, $u = 0.6$ или

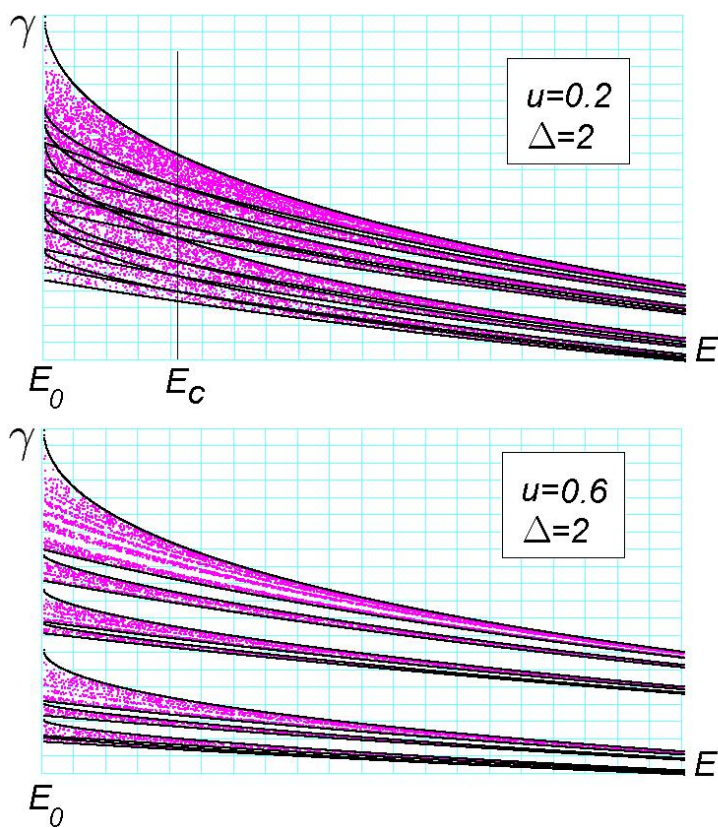


Рис. 14: Структура "аттрактора" случайного отображения (231), полученная компьютерным моделированием при $c = 0.7$, $u = 0.2$ и $u = 0.6$. Сплошными кривыми показаны границы первых 8-ми разрешенных отрезков, рассчитанных по формулам (243)(244). На верхнем рисунке $u = 0.2 < \Delta/4$ показана энергия E_c , при которой происходит исчезновение запрещенных отрезков. При $u > \Delta/4$ E_c становится меньше границы спектра E_0 – "погружается" в спектр (нижний рисунок).

$u = 0.2$), а энергия E равномерно изменялась в диапазоне $E_0 < E < 1.1E_0$. Полученные 50000 точек (γ_n, E) строились на плоскости (γ, E) (рис.14). Плотность точек по вертикали при заданном E определяется функцией $\rho(\gamma)$. Также на рис.14 показаны несколько граничных линий разрешенных отрезков, построенных при помощи алгоритма, описанного выше. Из рис.14 видно, что при достаточно малом беспорядке ($u = 0.2$), существует такое значение энергии E_c , при котором запрещенные отрезки исчезают. Значение E_c определяется из уравнения

$$\gamma'_+(E_c) = \gamma'_-(E_c) \quad \text{или} \quad \sqrt{(E_c + u)^2 - 4\Delta^2} - \sqrt{(E_c - u)^2 - 4\Delta^2} = 6u, \quad (247)$$

которое представляет собой условие исчезновения первого запрещенного отрезка (237). Это влечет за собой исчезновение остальных запрещенных отрезков, которые получаются из первого отображениями \hat{O}_\pm . Таким образом, при $E < E_c$ описанный выше алгоритм построения $\rho(\gamma)$ нуждается в модификации. Это, однако, совершенно не важно для вычисления усредненных КФГ и объемной функции Грина (229), которые достаточно вычислить при $E > E_c$, и аналитически продолжить на всю комплексную плоскость. Нетрудно показать, что при $u > \Delta/4$, E_c становится меньше чем $2\Delta + u$ – т.е. E_c "погружается" в спектр гамильтониана. По-видимому, это "погружение" не связано ни с каким критическим поведением рассматриваемой разупорядоченной системы, однако вопрос этот пока остается открытым. В следующем разделе будут описаны вычисления средних КФГ и объемной функции Грина.

Бинарный беспорядок. Усредненные КФГ и объемная функция Грина

Если выполнено n этапов описанного в предыдущем разделе алгоритма построения функции распределения $\rho(\gamma)$, то для усредненной КФГ можно написать следующее приближенное выражение:

$$\langle \gamma(E) \rangle = \int_{\gamma_+}^{\gamma_-} \rho(\gamma) \gamma d\gamma \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M I_i(h_i(E) + l_i(E)), \quad M \equiv 2^{n+1} \quad (248)$$

Функции $h_i(E)$ и $l_i(E)$ аналитические по E , т.к. они получаются применением аналитических по E отображений $\hat{O}_\pm(E)$ к функциям $\gamma_\pm(E)$, также аналитическим по E . Поэтому

описанный выше алгоритм допускает аналитическое продолжение по E и с его помощью усредненная $K\Phi\Gamma$ может быть вычислена при любом E .

Несколько более громоздкое, но методически аналогичное, вычисление объемной функции Грина по формуле (229) приводит к следующей приближенной формуле:

$$\langle g(E) \rangle \approx \sum_{i,j=1}^M \frac{I_i I_j}{(h_i - l_i)(h_j - l_j)} \left(c \Phi_{ij}(E - u) + (1 - c) \Phi_{ij}(E + u) \right), \quad (249)$$

где функции $\Phi_{ij}(z)$ определяются так:

$$\Phi_{ij}(z) \equiv \frac{1}{\Delta^4} \left([z - \Delta^2(l_i + l_j)] \ln[z - \Delta^2(l_i + l_j)] + [z - \Delta^2(h_i + h_j)] \ln[z - \Delta^2(h_i + h_j)] - [z - \Delta^2(h_i + l_j)] \ln[z - \Delta^2(h_i + l_j)] - [z - \Delta^2(l_i + h_j)] \ln[z - \Delta^2(l_i + h_j)] \right)$$

На рис.15 (а) показаны $\text{Im}\langle g(E) \rangle$ (плотность состояний), полученная компьютерной диагонализацией и усреднением по 10000 реализаций (нижний график) и $\text{Im}\langle g(E) \rangle$, полученная в 6 этапов с помощью описанного выше алгоритма по формуле (249) (приподнятый график). На рис.15 (b) приведены $\text{Im}\langle \gamma(E) \rangle$ (плотность возбуждений на конце цепочки), полученная компьютерной диагонализацией и усреднением по 10000 реализаций (нижний график) и $\text{Im}\langle \gamma(E) \rangle$, полученная в 10 этапов по формуле (248). Здесь и всюду ниже при компьютерной диагонализации использовались случайные матрицы размером 200×200 . Приведенные на рис.15 (а,b) зависимости соответствуют случаю сильного беспорядка ($c = 0.5, u = 1, \Delta = 2$), и функция распределения $\rho(\gamma)$ более или менее однородно заполняет интервал $[\gamma_+, \gamma_-]$. Поэтому достаточно небольшого числа этапов, чтобы получить хорошее согласие. Качество зависимостей, полученных по формулам (248)(249) выше, чем полученных численной диагонализацией и усреднением, а времени для реализации 6 этапов требуется гораздо меньше.

Согласие несколько ухудшается при переходе к более упорядоченной системе $c = 0.9, u = 1, \Delta = 2$, (рис.15 (с), плотность состояний $\text{Im}\langle g(E) \rangle$) В этом случае разрешенные отрезки остаются теми же, что и в предыдущем случае, и требуется большее количество этапов чтобы сместить максимум $\rho(\gamma)$ к γ_- . Поэтому описанный алгоритм особенно эффективен при расчете сильно разупорядоченных цепочек.

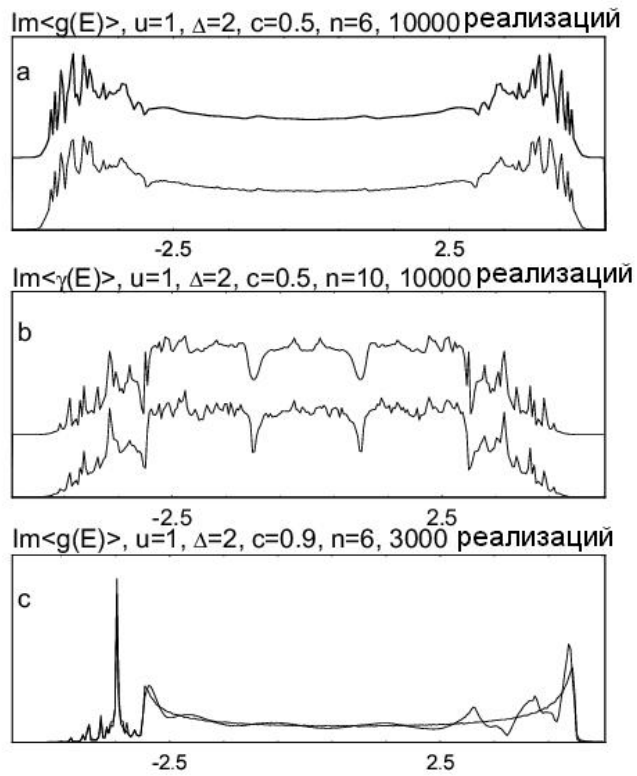


Рис. 15: а – $\text{Im}\langle g(E) \rangle$ – плотность состояний, полученная численной диагонализацией случайной матрицы (1) (нижний график) и в 6 этапов алгоритма (243)(244)(245) (приподнятый график), б – $\text{Im}\langle \gamma(E) \rangle$, нижний график – численная диагонализация, приподнятый график – 10 этапов алгоритма (243)(244)(245). с – то же для более упорядоченной системы ($c=0.9$), осцилляции справа на зависимости полученной алгоритмом (243)(244)(245).

Функция распределения КФГ при равномерном беспорядке.

Как уже было отмечено выше, при равномерном беспорядке функция $\rho(\gamma)$ отлична от нуля только при $\gamma \in [\gamma_+, \gamma_-]$ (обозначения те же, что и во втором разделе). Если γ такова, что верхний предел интегрирования в (230') $h(\gamma)$ больше γ_- , а нижний $l(\gamma)$ меньше γ_+ (этому соответствует $\gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]$, рис.12), то интеграл в (230') обращается в единицу и, следовательно:

$$\rho(\gamma) = \frac{1}{2u\gamma^2} \text{ при } \gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-] \quad (250)$$

Теперь допустим, что γ такова, что $\gamma'_+ < h(\gamma) < \gamma'_-$, т.е. верхний предел интегрирования $h(\gamma)$ в (230') находится в области, где функция $\rho(\gamma)$ известна точно из (250). При этом $l(\gamma) < \gamma_+$. Следовательно, интегрирование в (230') от γ'_+ до $h(\gamma)$ может быть выполнено в явном виде:

$$\rho(\gamma) = \frac{1}{2u\gamma^2} \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x)dx + \frac{1}{4u^2\gamma^2\gamma'_+} - \left(\frac{\Delta}{2u}\right)^2 \frac{1}{(E+u)\gamma^2 - \gamma} \text{ при } \gamma'_+ < h(\gamma) < \gamma'_- \quad (251)$$

Нетрудно убедиться в том, что в этом случае γ попадает в интервал, полученный из $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ отображением \hat{O}_+ . Таким образом, в этом интервале $\rho(\gamma)$ известна с точностью до константы S_+ , определенной как:

$$S_+ \equiv \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x)dx \quad (252)$$

Аналогично можно показать, что если γ такова, что $\gamma'_+ < l(\gamma) < \gamma'_-$, т.е. нижний предел интегрирования $l(\gamma)$ в (230') находится в области, где функция $\rho(\gamma)$ известна точно из (250), то:

$$\rho(\gamma) = \frac{S_-}{2u\gamma^2} - \frac{1}{4u^2\gamma^2\gamma'_-} + \left(\frac{\Delta}{2u}\right)^2 \frac{1}{(E-u)\gamma^2 - \gamma}, \text{ при } \gamma'_+ < l(\gamma) < \gamma'_- \quad (253)$$

где константа S_- определяется так:

$$S_- \equiv \int_{\gamma'_-}^{\gamma_-} \rho(x)dx \quad (254)$$

При этом $\gamma \in \hat{O}_-[\gamma'_+, \gamma'_-]$.

Условие нормировки $\rho(\gamma)$

$$S_+ + S_- + \int_{\gamma'_+}^{\gamma'_-} \frac{d\gamma}{2u\gamma^2} = 1 \quad (255)$$

и определения (236) дают следующее соотношение между S_- и S_+ :

$$S_+ + S_- = \frac{\Delta^2}{2u}(\gamma_- - \gamma_+) \quad (256)$$

Рассуждая дальше таким образом, можно убедиться в том, что $\rho(\gamma)$ может быть определена на отрезках, полученных из $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ отображениями \hat{O}_\pm с точностью до все возрастающего числа констант.

Принтегрируем теперь уравнение (230') от γ_+ до γ'_+ . При этом в правой части получим S_+ . Интегрируя левую часть по частям, нетрудно показать, что S_+ связана с усредненной КФГ следующим соотношением:

$$\int_{\gamma_+}^{\gamma_-} x\rho(x)dx = \langle \gamma(E) \rangle = \gamma_- - \frac{2u}{\Delta^2} S_+ \quad (257)$$

Ниже мы опишем приближенный метод расчета S_+ . Для этого сделаем следующее предварительное замечание. Из уравнения (230') для равномерного беспорядка следует, что $\rho(\gamma)$ непрерывна, а из приведенных выше соображений вытекает что она локально аналитична на некоторой совокупности неперекрывающихся отрезков. Таким образом, функция $\rho(\gamma)$ в данном случае не является столь сложной как в случае бинарного беспорядка и есть все основания надеяться, что ее можно аппроксимировать несколькими гладкими функциями. В качестве таковых мы возьмем функции (250),(251) и (253). Пусть $\gamma \approx \gamma_+$. Из сказанного выше вытекает, что в этом случае $\rho(\gamma)$ естественно аппроксимировать формулой (251), тем более, что при некоторых γ эта формула является точной. При $\gamma \approx 0.5(\gamma_+ + \gamma_-)$, $\rho(\gamma)$ определяется формулой (250), а при $\gamma \approx \gamma_-$ – формулой (253). Зависимости (250),(251),(253) могут пересекаться с осью X и друг с другом. Обозначим $\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4$ точки пересечения (251) с осью X , (251) и (250), (250) и (253) и (253) с осью X соответственно и построим функцию $\rho(\gamma)$ (рис.16) так:

$$\rho(\gamma) = \begin{cases} \text{формула (251)} & \gamma \in [\gamma_1, \gamma_2] \\ \text{формула (250)} & \gamma \in [\gamma_2, \gamma_3] \\ \text{формула (253)} & \gamma \in [\gamma_3, \gamma_4] \\ 0 & \text{в остальных случаях} \end{cases} \quad (258)$$

Нетрудно определить положение всех точек γ_i , $i = 1, \dots, 4$, как функций S_+ . После

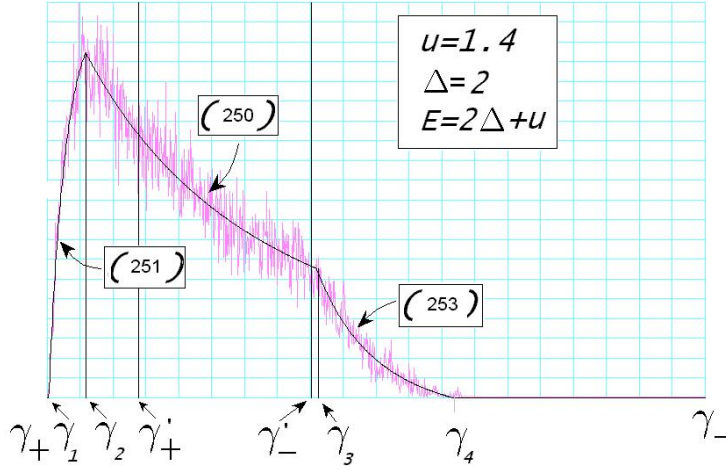


Рис. 16: Гладкий график – функция распределения КФГ, составленная из зависимостей (250),(251),(253) по предлагаемой схеме, "шумящий" график – та же функция, полученная компьютерным моделированием.

этого уравнение:

$$S_+ = \int_{\gamma_1}^{\gamma_+} \rho(x) dx \quad (259)$$

позволяет получить для S_+ следующее трансцендентное уравнение:

$$\left(\frac{2u}{\Delta}\right)^2 S_+ - \ln\left(1 - \frac{2u\gamma'_+}{2u\gamma'_+ S_+ + 1}\right) = 2u\gamma_- \quad (260)$$

Это уравнение вместе с (256) и (236) позволяет определить S_- и S_+ и построить $\rho(\gamma)$ в виде (258). Типичный результат приведен на рис.16, где также показана функция $\rho(\gamma)$, полученная компьютерным моделированием. Пользуясь (257), нетрудно получить уравнение, неявно определяющее КФГ $\langle\gamma(E)\rangle$:

$$\langle\gamma\rangle = \frac{1}{2u} \ln \frac{E + u - \Delta^2 \langle\gamma\rangle}{E - u - \Delta^2 \langle\gamma\rangle} \quad (261)$$

Это уравнение дает точные ответы в предельных случаях $u = 0$ и $\Delta = 0$, и хорошо описывает компьютерные результаты при произвольных u и Δ (рис.17). Уравнение (261) также позволяет в явном виде вычислить границы спектра гамильтониана (224) при равномерном беспорядке (они, очевидно, симметричны). Граничной энергии соответствует исчезновение вещественного решения уравнения (261) – в области спектра КФГ

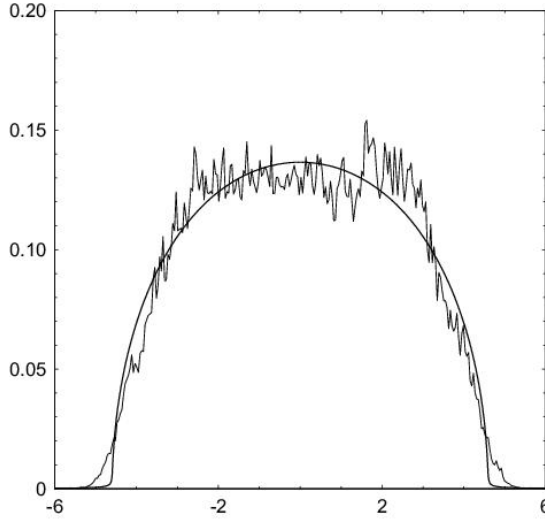


Рис. 17: Усредненная $\text{Im}\langle\gamma(E)\rangle$, полученная с помощью (261) для $u = \Delta = 2$ (гладкая кривая) и также функция, полученная компьютерной диагонализацией и усреднением по 5000 реализаций

имеет мнимую часть. Несложный графический анализ уравнения (261) показывает, что вещественное решение пропадает, когда левая и правая части (261) касаются в точке пересечения:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \ln \frac{E + u - \Delta^2 x}{E - u - \Delta^2 x} &= 2u \\ 2ux &= \ln \frac{E + u - \Delta^2 x}{E - u - \Delta^2 x} \end{aligned} \quad (262)$$

Из этой системы уравнений определяется граничная энергия E_0 :

$$E_0 = \sqrt{u^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{2u} \ln \frac{\sqrt{u^2 + \Delta^2} + u}{\sqrt{u^2 + \Delta^2} - u} \quad (\text{равномерный беспорядок}) \quad (263)$$

На рис.18 приведено сравнение этой формулы с компьютерным расчетом при изменении величины беспорядка u . Видно, что при большой величине беспорядка u ширина спектра не зависит от Δ – беспорядок "подавляет" межатомное взаимодействие Δ . В этом проявляется отличие равномерно разупорядоченной системы от бинарно разупорядоченной, для которой граница спектра определяется формулой:

$$E_0 = 2\Delta + u \quad (\text{бинарный беспорядок}) \quad (264)$$

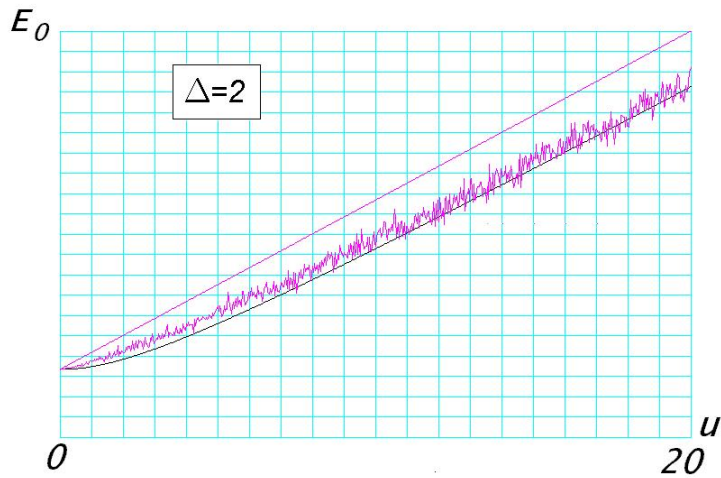


Рис. 18: Зависимость края спектра гамильтониана (224) от величины беспорядка u при $\Delta = 2$. Гладкая кривая – формула (263), "шумящая" кривая – компьютерное моделирование, для случая равномерного беспорядка, прямая линия – зависимость края спектра для случая бинарного беспорядка, формула (264).

и при котором включение взаимодействия Δ вызывает смещение спектра 2Δ при любом беспорядке. Результаты этой части диссертации опубликованы в [66].

0.4.3 Коррелированная модель Ллойда: точное решение

Введение

В последнее время все более популярным становится исследование *коррелированных* разупорядоченных систем [20, 22, 23, 72, 73, 74, 55]. Если в исторически первых моделях случайных систем, как правило, исследовался δ -коррелированный случайный потенциал и вопросу о влиянии корреляций уделялось сравнительно мало внимания, то недавние исследования показали, что корреляции могут приводить к существенному (иногда, качественному) [20, 21] изменению энергетической структуры и локализационных свойств разупорядоченных систем.

В любой области теоретической физики чрезвычайно важную роль играют точнорешаемые модели, число которых обычно невелико. Точнорешаемая модель дает возможность с высокой степенью достоверности накопить качественную информацию о том классе моделей, к которому она относится, позволяет проверить применяемые приближения, позволяет указать направление дальнейших исследований и т.д. В физике разупорядоченных систем наиболее известными и важными являются упомянутые выше точнорешаемые модели Дайсона [24] и Ллойда [16], причем существенно то, что обе указанные модели относятся к *некоррелированным* разупорядоченным системам. В данной части третьей главы диссертационной работы для обобщенной одномерной модели Ллойда, в которой *узельные энергии не являются независимыми случайными величинами*, приводится точное вычисление усредненной функции Грина и показывается, что она *независит* от параметра модели, играющего роль радиуса корреляции.

Эта часть третьей главы диссертации построена следующим образом. В первом разделе рассматривается классическая модель Ллойда, для которой приводятся необходимые для дальнейшего результаты и определения (этот материал в значительной степени воспроизводит материал обзора работы). Во втором разделе описывается коррелированный беспорядок, для которого в третьем разделе приводится точное вычисление усредненной функции Грина.

Модель Ллойда

Матрица \mathbf{H} гамильтониана классической одномерной модели Ллойда имеет базовый для диссертационной работы вид (4):

$$H_{rr'} = \delta_{rr'}\varepsilon_r + w(r - r') \quad r, r' = 1, 2, 3, \dots, N \quad (265)$$

причем функция $w(r)$ считается заданной и такой, что $w(0) = 0$, а диагональные элементы (энергии узлов) ε_r являются независимыми одинаково распределенными случайными величинами, плотность распределения которых имеет вид распределения Коши

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + \varepsilon^2} \quad (266)$$

Параметр Δ характеризует степень разупорядоченности системы – при $\Delta \rightarrow 0$ гамильтониан (265) соответствует упорядоченной (кристаллической) системе и диагонализуется в представлении плоских волн. О совокупности пронумерованных узельных энергий часто говорят как о случайном потенциале.

В своей работе [16] Ллойд сумел точно вычислить матрицу усредненной функции Грина $\langle \mathbf{G}(\Omega) \rangle = \langle [\Omega - \mathbf{H}]^{-1} \rangle$, ($\Omega \equiv E + i0$) для модельной системы (265), (266), которая (функция Грина) определяет ее спектр линейной восприимчивости и плотность состояний. В этом разделе мы воспроизведем результат Ллойда с помощью диаграммной техники, подобной предложенной в [26] (см. также [68]), которая заключается в следующем.²¹ Введем матрицу \mathbf{W} с элементами $W_{rr'} \equiv w(r - r')$. Тогда матрица функции Грина \mathbf{G} может быть представлена в виде следующего ряда (43):

$$G_{rr'}(\Omega) = \frac{\delta_{rr'}}{\Omega - \varepsilon_r} + \frac{1}{\Omega - \varepsilon_r} W_{rr'} \frac{1}{\Omega - \varepsilon'_r} + \sum_{r''} \frac{1}{\Omega - \varepsilon_r} W_{rr''} \frac{1}{\Omega - \varepsilon''_r} W_{r''r'} \frac{1}{\Omega - \varepsilon_r} + \dots \quad (267)$$

Сопоставим величинам $W_{r,r'}$ стрелку, соединяющую узлы r и r' , а каждому множителю $[\Omega - \varepsilon_r]^{-1}$ – жирную точку в соответствующем узле r , который будем изображать кружком. Примеры подобного сопоставления приведены на рис.19 (рис.1). Тогда для матричного элемента $G_{rr'}(\Omega)$ функции Грина можно написать следующее выражение

$$G_{rr'}(\Omega) = \text{Сумма всех диаграмм, соединяющих узлы } r \text{ и } r' \quad (268)$$

²¹Здесь мы для связности повествования частично воспроизведем материал (около 0.5 страницы и рисунок), приведенный в обзоре.

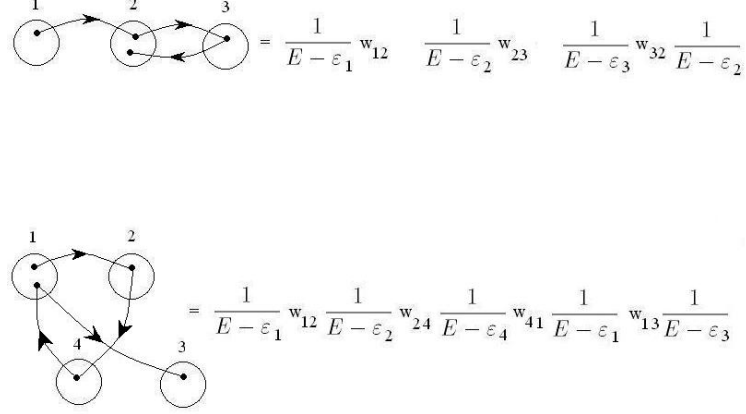


Рис. 19: Примеры диаграмм

Для того чтобы вычислить искомую усредненную функцию Грина следует проинтегрировать (268) с совместной функцией распределения узельных энергий $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N$, которая в случае некоррелированного беспорядка представляется в виде произведения:

$$\rho_{nc}(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i=1}^N P(z_i), \quad (269)$$

причем для рассматриваемой модели Ллойда функция $P(z)$ имеет вид (266). Усреднение произвольной диаграммы D в разложение (268), связано с усреднением фактора f_D определяемого как:

$$f_D \equiv \left(\frac{1}{\Omega - \varepsilon_{n_1}} \right)^{g_1} \left(\frac{1}{\Omega - \varepsilon_{n_2}} \right)^{g_2} \dots \left(\frac{1}{\Omega - \varepsilon_{n_q}} \right)^{g_q} \quad (270)$$

где n_1, n_2, \dots, n_q – номера узлов, через которые проходит диаграмма D , а g_1, g_2, \dots, g_q числа посещения диаграммой узлов n_1, n_2, \dots, n_q соответственно. Например, для верхней диаграммы рис.1 $n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 3$ и $g_1 = 1, g_2 = 2, g_3 = 1$. Узловым в решении Ллойда является соотношение

$$\frac{1}{\pi} \int \frac{\Delta dz}{\Delta^2 + z^2} \left(\frac{1}{E + i0 - z} \right)^n = \left(\frac{1}{E + i\Delta} \right)^n \quad (271)$$

Принимая во внимание это соотношение и пользуясь тем, что случайные узельные энергии $\varepsilon_{n_i}, i = 1, 2, \dots, q$ взаимно независимы, получаем для усредненного фактора f_D следующее выражение:

$$\langle f_D \rangle = \int \prod_{i=1}^N dz_i P(z_i) \left(\frac{1}{\Omega - z_{n_1}} \right)^{g_1} \left(\frac{1}{\Omega - z_{n_2}} \right)^{g_2} \dots \left(\frac{1}{\Omega - z_{n_q}} \right)^{g_q} = \quad (272)$$

$$= \left(\frac{1}{\Omega + i\Delta} \right)^{g_1} \left(\frac{1}{\Omega + i\Delta} \right)^{g_2} \cdots \left(\frac{1}{\Omega + i\Delta} \right)^{g_q}$$

Это выражение соответствует диаграмме D функции Грина *упорядоченной* системы, у которой все узельные энергии равны нулю, и произведена замена энергетического аргумента $\Omega \rightarrow \Omega + i\Delta$. Поскольку приведенный расчет справедлив для любой диаграммы в разложении (268), мы приходим к результату Ллойда: *усредненная функция Грина разупорядоченной системы с гамильтонианом (265) и некоррелированным беспорядком типа Коши (266) равна функции Грина \mathbf{G}^{od} упорядоченной системы с нулевыми узельными энергиями, в которой следует произвести замену энергетического аргумента $\Omega \rightarrow \Omega + i\Delta$.*

$$\langle \mathbf{G}(\Omega) \rangle = \mathbf{G}^{od}(\Omega + i\Delta) \quad (273)$$

Явный вид матрицы функции Грина \mathbf{G}^{od} упорядоченной (и циклической) системы можно написать, пользуясь тем, что собственные векторы (265) при $\varepsilon_r = 0$ ($r = 1, \dots, N$) представляют собой плоские волны. Для одномерной системы эта матрица имеет вид:

$$G_{rr'}^{od}(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{i(r-r')q}}{\Omega - J_q} dq, \quad J_q = \sum_r w(r) e^{-iqr} \quad (274)$$

В следующем разделе будет описан простейший коррелированный дискретный случайный процесс $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_i, \dots, \varepsilon_N$, для которого возможно вычисление полной совместной функции распределения $\rho(z_1, z_2, \dots, z_N)$, которая не разбивается на произведение типа (269). В заключительном третьем разделе мы покажем, что для случайного гамильтониана типа (265), построенного для такого случайного процесса, результат (273) сохраняется.

Коррелированный беспорядок

Получим коррелированную последовательность узельных энергий $\varepsilon_r, r = 1, \dots, N$ с помощью следующей процедуры *сглаживания*²² [75, 76]. Введем совокупность независимых случайных величин $\xi_i, i = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, +\infty$. Каждая из введенных случайных величин ξ_i имеет функцию распределения $P(\xi)$, которую мы будем считать заданной и независимой от номера i . Узельные энергии ε_n получим из этих величин как реализацию

²² Аналогичный механизм корреляции рассматривался в [42] при расчете степени локализации состояний в коррелированной системе.

следующего дискретного случайного процесса:

$$\varepsilon_n = (1 - e^{-\alpha}) \sum_{m \leq n} e^{\alpha(m-n)} \xi_m, \quad \alpha > 0 \quad n = 1, \dots, N \quad (275)$$

При таком построении ε_n будут коррелированы с характерным радиусом корреляции $R = 1/\alpha$, причем для корреляционной функции $\langle \varepsilon_n \varepsilon_{n'} \rangle$ имеет место выражение

$$\langle \varepsilon_n \varepsilon_{n'} \rangle = \langle \xi^2 \rangle \left(\frac{1 - e^{-\alpha}}{1 + e^{-\alpha}} \right) e^{-\alpha|n-n'|} = \langle \xi^2 \rangle \left(\frac{1 - \beta}{1 + \beta} \right) e^{-\alpha|n-n'|}, \quad \beta \equiv e^{-\alpha}, \quad \beta \in [0, 1] \quad (276)$$

Из определения (275) нетрудно получить следующее важное для дальнейшего соотношение:

$$\varepsilon_{n+1} = \beta \varepsilon_n + (1 - \beta) \xi_{n+1} \quad (277)$$

Корреляционная функция (276) имеет смысл только при конечном втором моменте функции $P(\xi)$ и в случае, если $P(\xi)$ есть функция Коши (266), не существует. Тем не менее, и в этом случае последовательность (275) нельзя считать некоррелированной, поскольку, как мы увидим ниже, ее функция распределения не имеет вида (269). Наконец, отметим, что последовательность (275) причинно-коррелирована, т.е. ε_n зависит только от тех ξ_m , у которых $m \leq n$.

Функция распределения узельной энергии в коррелированной цепи

Функция распределения любой узельной энергии ε_n (обозначим ее $\sigma(\varepsilon)$) независит от ее номера n и мы и рассчитаем ее для $n = 0$ стандартным способом [75, 76]. В качестве исходных используем следующие общие выражения для искомой функции $\sigma(\varepsilon)$ и соответствующей характеристической функции $\tilde{\sigma}(t)$:

$$\sigma(\varepsilon) = \left\langle \delta \left(\varepsilon - [1 - \beta] \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m \xi_m \right) \right\rangle \equiv \int e^{i\varepsilon t} \tilde{\sigma}(t) \quad (278)$$

$$\tilde{\sigma}(t) = \frac{1}{2\pi} \left\langle \exp -it \left([1 - \beta] \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m \xi_m \right) \right\rangle = \frac{1}{2\pi} \prod_{m=0}^{\infty} \int d\xi P(\xi) e^{-it[1-\beta]\beta^m \xi} \quad (279)$$

Здесь угловые скобки соответствуют усреднению по независимым случайным величинам ξ_m . Обозначая преобразование Фурье функции $P(\xi)$ через $\tilde{P}(t)$: $\tilde{P}(t) = \int P(\xi) e^{-it\xi} d\xi$,

получаем для $\tilde{\sigma}(t)$ следующую формулу:

$$\tilde{\sigma}(t) = \frac{1}{2\pi} \prod_{m=0}^{\infty} \tilde{P}\left(t[1-\beta]\beta^m\right) \quad (280)$$

Если $P(\xi)$ представляет собой распределение Коши (266), то

$$\tilde{P}(t) = e^{-|t\Delta|} \Rightarrow \tilde{\sigma}(t) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-|t|[1-\beta]\Delta \sum_{m=0}^{\infty} \beta^m\right) = \frac{1}{2\pi} e^{-|t|\Delta} \quad (281)$$

и в этом случае функция распределения узельных энергий также имеет вид функции Коши (266)

$$\sigma(\varepsilon) = P(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + \varepsilon^2} \quad (282)$$

Функция распределения случайного процесса (275)

Дискретный коррелированный случайный процесс ε_n (275) полностью определяется совместной функцией распределения всех узельных энергий $\rho(z_1, z_2, \dots, z_N)$, которую можно вычислить аналитически. Для этого введем функции совместной плотности вероятности первых M ($0 < M < N$) узельных энергий $\rho_M(z_1, z_2, \dots, z_M)$, так что $\rho_M(z_1, z_2, \dots, z_M) dz_1 \dots dz_M$ есть вероятность того, что $\varepsilon_i \in [z_i, z_i + dz_i]$, $i = 1, \dots, M$. Пользуясь соотношением (293) можно получить рекуррентное соотношение, выражающее ρ_{M+1} через ρ_M :

$$\begin{aligned} \rho_{M+1}(z_1, z_2, \dots, z_{M+1}) &= \left\langle \delta(z_1 - \varepsilon_1) \dots \delta(z_M - \varepsilon_M) \delta(z_{M+1} - \varepsilon_{M+1}) \right\rangle = \quad (283) \\ &= \left\langle \delta(z_1 - \varepsilon_1) \dots \delta(z_M - \varepsilon_M) \delta(z_{M+1} - \beta\varepsilon_M - [1-\beta]\xi_{M+1}) \right\rangle = \\ &= \int d\xi dy_1 \dots dy_M \rho_M(y_1, \dots, y_M) P(\xi) \delta(z_1 - y_1) \dots \delta(z_M - y_M) \delta(z_{M+1} - \beta y_M - [1-\beta]\xi) = \\ &= \frac{1}{1-\beta} \rho_M(z_1, \dots, z_M) P\left(\frac{z_{M+1} - \beta z_M}{1-\beta}\right) \end{aligned}$$

Последовательно применяя это соотношение и учитывая, что $\rho_1(z) = \sigma(z)$, получаем следующее выражение для функции $\rho_M(z_1, \dots, z_M)$

$$\rho_M(z_1, z_2, \dots, z_M) = \frac{1}{[1-\beta]^{M-1}} \overbrace{P\left(\frac{z_M - \beta z_{M-1}}{1-\beta}\right) P\left(\frac{z_{M-1} - \beta z_{M-2}}{1-\beta}\right) \dots P\left(\frac{z_2 - \beta z_1}{1-\beta}\right)}^{M-1} \sigma(z_1) \quad (284)$$

В рассматриваемом нами случае $\sigma(z) = P(z)$, где $P(z)$ определяется формулой (266). Полагая $M = N$, получаем следующее окончательное выражение для полной совместной функции распределения случайного процесса (275)

$$\rho(z_1, z_2, \dots, z_N) = \overbrace{P\left(\frac{z_N - \beta z_{N-1}}{1 - \beta}\right) P\left(\frac{z_{N-1} - \beta z_{N-2}}{1 - \beta}\right) \dots P\left(\frac{z_2 - \beta z_1}{1 - \beta}\right)}^{N-1} \frac{P(z_1)}{[1 - \beta]^{N-1}} \quad (285)$$

$$P(z) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta}{\Delta^2 + z^2}$$

Коррелированная модель Ллойда

Рассчитаем теперь усредненную функцию Грина разупорядоченной цепочки с гамильтонианом (265), в котором узельные энергии являются реализацией коррелированного случайного процесса (275). Рассмотрим, как и в первом разделе, произвольную диаграмму D , проходящую через узлы, номера которых мы без потери общности можем считать расположенными в порядке возрастания: $1 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_q \leq N$. Среднее значение $\langle f_D \rangle$ фактора (270) рассматриваемой диаграммы будет теперь определяться формулой, отличающейся от (272):

$$\langle f_D \rangle = \int dz_1 dz_2 \dots dz_N \left(\frac{1}{E + i\delta - z_{n_1}} \right)^{g_1} \left(\frac{1}{E + i\delta - z_{n_2}} \right)^{g_2} \dots \left(\frac{1}{E + i\delta - z_{n_q}} \right)^{g_q} \rho(z_1, z_2, \dots, z_N) \quad (286)$$

где функция $\rho(z_1, z_2, \dots, z_N)$ для рассматриваемой коррелированной модели Ллойда имеет вид (285). Поскольку $\delta > 0$, сомножители в больших круглых скобках в соотношении (286), рассматриваемые как функции комплексных z_{n_1}, \dots, z_{n_q} , не имеют особенностей в нижней полуплоскости комплексных z_{n_1}, \dots, z_{n_q} . Это позволяет использовать формулу (271) при вычислении фигурирующих в формуле (286) интегралов следующим образом.

Проведем интегрирования в соотношении (286) по всем z_i , у которых $n_q < i \leq N$. При этом у входящей в это соотношение функции (285) исчезнут первые $N - n_q$ сомножителей типа $P\left(\frac{z_N - \beta z_{N-1}}{1 - \beta}\right) P\left(\frac{z_{N-1} - \beta z_{N-2}}{1 - \beta}\right) \dots$ и знаменатель $[1 - \beta]^{N-1}$ заменится на $[1 - \beta]^{n_q-1}$. Интегрирование по z_{n_q} затрагивает только входящий в (285) лоренциан $P\left(\frac{z_{n_q} - \beta z_{n_q-1}}{1 - \beta}\right)$ и может быть выполнено с помощью формулы (271). С помощью этой формулы можно убедиться в том, что указанное интегрирование соответствует умножению на фактор $1 - \beta$ и замене $z_{n_q} \rightarrow \beta z_{n_q-1} - i\Delta(1 - \beta)$ во входящем в подынтегральное выражение в (286)

сомножителе $\left(\frac{1}{E+i\delta-z_{n_q}}\right)^{g_q}$. При этом полюс этой функции (по аргументу z_{n_q-1}) будет по-прежнему располагаться в верхней полуплоскости, что позволяет провести следующее интегрирование по z_{n_q-1} аналогичным образом. В функции совместной плотности вероятности (285) от этой переменной зависит сомножитель $P\left(\frac{z_{n_q-1}-\beta z_{n_q-2}}{1-\beta}\right)$. Как и в предыдущем случае, интегрирование по z_{n_q-1} соответствует умножению на фактор $1-\beta$ и замене $z_{n_q-1} \rightarrow \beta z_{n_q-2} - i\Delta(1-\beta)$ в сомножителе $\left(\frac{1}{E+i\delta-\beta z_{n_q-1}+i\Delta(1-\beta)}\right)^{g_q}$, возникшем в результате предыдущего интегрирования и т.д. Следовательно, каждое новое интегрирование по z_i с все меньшим номером i соответствует умножению на $1-\beta$ (т.е. сокращению такого множителя в знаменателе выражения (285)) и замене $z_i \rightarrow \beta z_{i-1} - i\Delta(1-\beta)$ аргумента в последнем сомножителе. Когда номер i переменной интегрирования снизится настолько, что $i = n_q-1$, то дальнейшие интегрирования можно проводить аналогично (т.е. просто производя замену аргументов), только теперь указанные выше замены следует производить также и в сомножителе $\left(\frac{1}{E+i\delta-z_{n_q-1}}\right)^{g_{q-1}}$.

Таким образом, мы приходим к выводу, что интегрирование по всем переменным в (286) соответствует последовательным заменам фигурирующих в (286) символов $z_{n_q}, \dots, z_{n_2}, z_{n_1}$ по приведенным выше правилам. Указанные замены для символа z_{n_q} производятся следующим способом:²³

$$\begin{aligned} z_{n_q} &= \beta z_{n_q-1} - i\Delta(1-\beta), \text{ где} & (287) \\ z_{n_q-1} &= \beta z_{n_q-2} - i\Delta(1-\beta), \text{ где} \\ z_{n_q-2} &= \beta z_{n_q-3} - i\Delta(1-\beta), \text{ где...} \\ & \dots \\ z_3 &= \beta z_2 - i\Delta(1-\beta), \text{ где...} \\ z_2 &= \beta z_1 - i\Delta(1-\beta). \end{aligned}$$

Последнее интегрирование по z_1 соответствует замене $z_1 \rightarrow -i\Delta$, поскольку это интегрирование производится с функцией $P(z_1)$ (см. (285)). Нетрудно видеть, что при $z_1 = -i\Delta$, цепочка замен (287) упрощается и соответствует замене $z_{n_i} = -i\Delta, i = 1, \dots, n_q$. Таким образом, усреднение (286) соответствует просто замене всех величин $z_{n_i}, i = 1, \dots, q$ на $-i\Delta$,

²³Поскольку n_q является самым большим из номеров n_i узлов рассматриваемой диаграммы, замены остальных символов также входят в приводимую ниже последовательность.

как и в случае некоррелированной модели Ллойда (272), и мы приходим к выводу, что *усредненная функция Грина коррелированной модели Ллойда с узельными энергиями вида (275) независит от радиуса корреляции $R = -1/\ln \beta$ и оказывается такой же, как и при отсутствии корреляций*, т.е. определяется формулой (273).

Отсутствие зависимости усредненной функции Грина от радиуса корреляции $R = -1/\ln \beta$ показывает своеобразную масштабную инвариантность рассматриваемой коррелированной модели Ллойда, поскольку пространственная зависимость (зависимость от номера узла) случайного потенциала ε_n (275) оказывается для различных R существенно различной (рис.20(d,c)).

Проиллюстрируем полученный результат примерами, когда функция Грина $\mathbf{G}^{od}(\Omega)$ (274) может быть вычислена аналитически. Первым (хорошо известным) примером такого рода является случай, когда гамильтониан имеет вид ленточной матрицы $H_{rr'}^{tb} = \delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}$ и диагональные элементы функции Грина определяются как $G_{nn}^{od}(\Omega) = [\Omega^2 - 4]^{-1/2}$. Согласно полученным выше результатам, средняя плотность состояний $\rho_{\Delta}^{tb}(E) = -\pi^{-1} \text{Im Sp} \langle \mathbf{G} \rangle$ случайной матрицы (265) с узельными энергиями ε_r вида (275) и при $w(r) = \delta_{r,1} + \delta_{r,-1}$, не зависит от радиуса корреляции $R = -1/\ln \beta$ и равна:

$$\rho_{\Delta}^{tb}(E) = -\frac{N}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\sqrt{(E + i\Delta)^2 - 4}} \quad (288)$$

Вторым (менее известным) примером является случай, когда матрица упорядоченного гамильтониана имеет вид: $H_{rr'}^{ex} = v_0 \exp -|r - r'|/R_0$.²⁴

²⁴Формула (289) не пользуется широкой популярностью и автору не удалось найти ссылку на нее. Поэтому кратко опишем, как она получается. Для замкнутой в кольцо цепочки $\Gamma(u)$ зависит только от разности своих индексов. Стандартные выкладки приводят к следующему выражению для $\Gamma_r(u)$:

$$\Gamma_r(u) = \frac{1}{N} \sum_{q=-\pi}^{\pi} \frac{\exp(-iqr)}{u - f_q}$$

где $f_q \equiv \sum_r w(r) \exp(iqr)$. Для случая экспоненциальной функции $w(r)$, функция f_q есть сумма геометрической прогрессии и точно вычисляется. В формуле для $\Gamma_r(u)$ сумма идет по первой зоне Бриллюэна с шагом $\Delta q = 2\pi/N$, и может быть заменена интегралом, если период экспоненты $2\pi/r$ много больше этого шага $r \ll N$ (т.е. термодинамически точно). Пользуясь периодичностью подынтегральной функции, можно вычислять указанный интеграл не по одной, а по $2M + 1$ зонам Бриллюэна, и затем получить

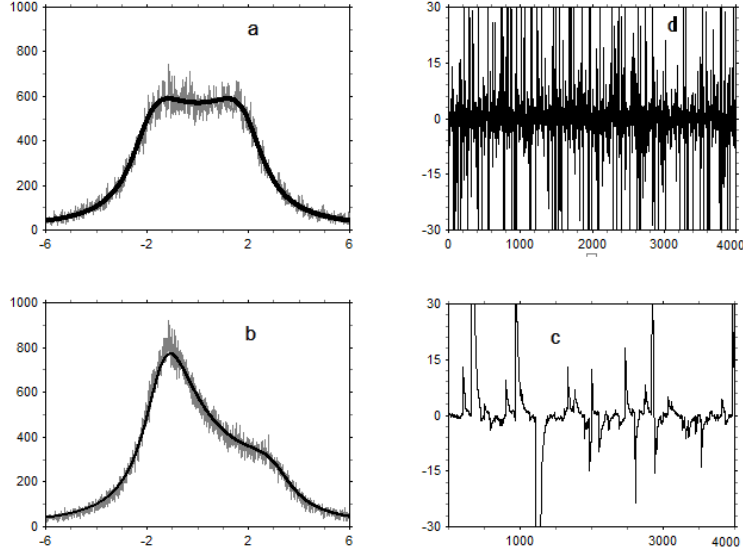


Рис. 20: Коррелированная модель Ллойда при различных радиусах корреляции R и различных видах функции $w(r)$, описывающей недиагональные элементы гамильтониана (265). Панели (a) и (b) – плотность состояний гамильтониана (265) при $w(r) = \delta_{1,r} + \delta_{-1,r}$ (a), и при $w(r) = v_0 \exp[-|r/R_1|]$ ($R_1 = 1, v_0 = \exp[1/R_1]$) (b). Шумящие зависимости на панелях (a) и (b) – получены численной диагонализацией гамильтониана (265), гладкие кривые – расчетом по формулам (288) и (290) соответственно. Плотности состояний, показанные на панелях (a) и (b), получены при радиусах корреляции $R = 0.1$ и $R = 30$ соответственно. Панели (d) и (c) – реализации случайных потенциалов при радиусах корреляции $R = 0.1$ и $R = 30$ соответственно. По оси абсцисс отложен номер узла n , по оси ординат – ε_n (275). Во всех случаях $\Delta = 1$. Размер случайных матриц при численных расчетах $N = 4000$.

В этом случае матрица функции Грина имеет вид:

$$\Gamma_{rr'}(\Omega) = A \exp(-|r - r'|/\eta) + \frac{\delta_{rr'}}{\Omega} \quad (289)$$

где

$$A \equiv \frac{V}{(\Omega - V)\Omega\sqrt{1 - T^2}}, \quad V \equiv v_0 \operatorname{th}\left(\frac{1}{R_0}\right), \quad \frac{1}{T} \equiv \frac{V - \Omega}{\Omega} \operatorname{ch}\left(\frac{1}{R_0}\right), \quad \operatorname{ch}\eta \equiv \left|\frac{1}{T}\right|$$

и плотность состояний случайной матрицы (265) при $w(r) = v_0 \exp -|r - r'|/R_0$ и ε_r (275) определяется выражением: ²⁵

$$\rho_{\Delta}^{ex}(E) = -\frac{N}{\pi} \operatorname{Im} \Gamma_{00}(E + i\Delta + v_0) \quad (290)$$

Для этих двух случаев численная диагонализация случайных матриц вида (265) при различных радиусах корреляции R показала, что плотность состояний описывается формулами (288) и (290) (с точностью до шумов) и действительно независит от R , притом что вид случайного потенциала (275) меняется очень сильно (рис.20).

Заключение

В данной части диссертационной работы приведен точный расчет усредненной функции Грина для коррелированной модели Ллойда. Показано, что для рассматриваемого вида случайного потенциала, усредненная функция Грина не зависит от параметра случайного потенциала, играющего роль радиуса корреляции. Полученный результат иллюстрируется численными расчетами.

Отметим, что, хотя выше рассматривалась одномерная разупорядоченная система, полученный результат сохраняет силу при произвольной размерности решетки, у которой искомый интеграл, поделив результат на $2M + 1$:

$$\frac{1}{N} \sum_{q=-\pi}^{\pi} \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq = \frac{1}{2\pi(2M+1)} \int_{-\pi(1+2M)}^{\pi(2M+1)} dq$$

Для экспоненциальной $w(r)$, функция f_q такая, что последний интеграл для $M \rightarrow \infty$ может быть вычислен по вычетам стандартным замыканием контура по большому кругу. Число вычетов растет пропорционально M .

²⁵Появление в этой формуле сдвига v_0 связано с тем, что функция Грина (289) получена для матрицы \mathbf{H}^{ex} , у которой диагональные элементы отличны от нуля и равны v_0 .

нумерация узлов и их случайные энергии удовлетворяют соотношению (275). Полученные в этой части диссертации результаты опубликованы в [67].

0.5 ВЫЧИСЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В СМЫСЛЕ КРИТЕРИЯ АНДЕРСОНА ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ ДИАГОНАЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ.

0.5.1 Постановка задачи и основные результаты

Математические модели современной физики разупорядоченных систем можно разделить на два класса – непрерывные и дискретные. К непрерывным относятся модели, в которых изучается *уравнение Шредингера* $(-\Delta + \mathcal{U}(r))\psi = E\psi$ со случайным потенциалом $\mathcal{U}(r)$, к дискретным – модели, в которых исследуется *случайная матрица* гамильтониана разупорядоченной системы. Несмотря на сходство, модели этих двух классов могут потребовать существенно разных методов анализа по следующей причине. Как известно [19], одним из важнейших свойств пространственно однородных разупорядоченных систем является возможность появления в них *локализованных состояний*, волновые функции которых существенно отличны от нуля в областях, средний размер которых, оставаясь конечным, перестает зависеть от объема разупорядоченной системы, когда этот объем стремится к бесконечности. Для непрерывных моделей бесконечного объема критерием локализации, по-видимому, может служить разделение энергетического спектра на дискретную и непрерывную части, причем локализованными считаются интегрируемые с квадратом состояния дискретной части спектра. Энергетический спектр дискретных моделей, будучи спектром случайной матрицы, всегда дискретен, поэтому для характеристики состояний в этом случае необходимо применение других критериев, одним из которых является критерий Андерсона [31, 19, 98].

Наиболее глубокий теоретический анализ возможен для одномерных моделей разупорядоченных систем, которые мы и будем иметь ввиду ниже. Для одномерных непрерывных моделей считается доказанным, что уравнение Шредингера со случайным однородным потенциалом достаточно общего вида имеет только дискретный спектр, что соответствует локализованному характеру всех состояний при сколь угодно малом бес-

порядке [19, 99]. Перенесение этого утверждения на дискретные модели, на наш взгляд, не очевидно по причине полной дискретности спектра таких моделей даже в отсутствии беспорядка, когда все состояния заведомо делокализованы. В этой главе диссертационной работы для простейшей диагонально разупорядоченной цепочки выполнено исследование характера собственных состояний в смысле критерия Андерсона, который, обладая простым физическим смыслом, может быть применен как к дискретным так и к непрерывным моделям.

Перейдем к постановке задачи. Как и в заключительных разделах предыдущей главы рассмотрим одномерную дискретную модель диагонально разупорядоченной системы, для которой матрица гамильтониана (матрица типа (4)) \mathbf{H} имеет следующие элементы:

$$H_{r,r'} = \delta_{r,r'}\varepsilon_r + \delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}, \quad r, r' = 1, \dots, N \quad (291)$$

Такой гамильтониан описывает в приближении ближайших соседей экситон Френкеля в цепочке, состоящей из N двухуровневых атомов. Расщепление ε_r двухуровневого атома с номером r в этой модели является случайной величиной, функция распределения P которой предполагается известной. Равные единице недиагональные элементы (291) определяют единицу измерения энергии. Всюду ниже мы будем подразумевать термодинамический предел $N \rightarrow \infty$.

Для такой модели рассмотрим следующую задачу. Пусть при $t = 0$ крайний атом ($r = N$) был возбужден и требуется найти вероятность D того, что этот атом останется в возбужденном состоянии при $t \rightarrow \infty$. Математически это означает, что начальное состояние системы описывается волновой функцией (вектором-столбцом) $\Psi(0)$ с компонентами $\Psi_r(0) = \delta_{r,N}$, и требуется найти $D = \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle$, причем угловые скобки обозначают усреднение по реализациям случайных расщеплений $\varepsilon_r, r = 1, \dots, N$. Зависимость волновой функции системы от времени определяется следующим образом: $\Psi(t) = \exp(i\mathbf{H}t)\Psi(0)$. Отсюда следует, что интересующая нас величина D может быть выражена через собственные векторы Ψ^λ и собственные числа $E_\lambda, \lambda = 1, \dots, N$ матрицы (265) следующим образом:

$$D = \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \sum_{\lambda\lambda'} |\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 \exp i(E_\lambda - E_{\lambda'})t \right\rangle = \left\langle \sum_{\lambda} |\Psi_N^\lambda|^4 \right\rangle \quad (292)$$

Сходные величины анализируются при численном исследовании разупорядоченных

цепочек, например, в [32, 100, 101]. Относительно величины D можно сделать следующие качественные заключения. Допустим, что все собственные функции гамильтониана (291) *делокализованы* в том смысле, что их амплитуда примерно одинакова в любой области цепочки. Квадрат амплитуды таких функций на крайнем узле оценивается как $|\Psi_N^\lambda|^2 \sim 1/N$, причем все N собственных функций вносят в (292) примерно одинаковый вклад $|\Psi_N^\lambda|^4 \sim 1/N^2$. Следовательно, если состояния (291) делокализованы в указанном выше смысле, то в термодинамическом пределе $D \sim 1/N \rightarrow 0$. Рассмотрим теперь ситуацию, когда среди собственных функций (291) есть *локализованные* в том смысле, что их амплитуда существенно отличается от нуля лишь в некоторой области цепочки, причем размер этой области не зависит от N при $N \rightarrow \infty$. Вклад функций такого типа в (292) не будет зависеть от N поскольку он определяется лишь теми из этих функций, которые имеют существенно отличную от нуля амплитуду на крайнем узле. В этом случае величина D остается конечной в термодинамическом пределе. Критерий Андерсона вводится на основе приведенных качественных рассуждений следующим образом: *Если величина D конечна, то среди собственных функций гамильтониана (291) есть локализованные в смысле критерия Андерсона.*

Для того чтобы судить о степени локализации собственных векторов (291) в спектральном интервале $[U, U + dU]$, введем функцию "участия" $W(U)$,²⁶ которую определим следующим соотношением:

$$W(U)dU = \left\langle \sum_{E_\lambda \in [U, U+dU]} |\Psi_N^\lambda|^4 \right\rangle, \quad (293)$$

Очевидно $D = \int W(U)dU$. Рассуждения, аналогичные приведенным выше, показывают, что, если все состояния в интервале $[U, U+dU]$ делокализованы, то $W(U) = 0$. В противном случае $W(U)$ отлична от нуля. Кроме того, функция (293) дает количественную информацию о средней величине собственных векторов случайной матрицы (291) на крайнем узле в спектральном интервале $[U, U + dU]$. Фантастические возможности современных персональных компьютеров позволяют за обозримое время проводить диагонализацию матриц (291) и в таком численном эксперименте "наблюдать" величины (292) и (293) при $N \sim 1000$ и более. Основной задачей, исследуемой в данной главе диссертации (а также в 4 следующих главах), является теоретический расчет этих величин.

²⁶ $W(U)$ имеет много общего с так называемым inverse participation ratio (IPR)[44].

В этой главе диссертационной работы получены следующие основные результаты:

1. Получено замкнутое уравнение на совместную функцию распределения (статистику) опережающей и запаздывающей краевой функций Грина гамильтониана (291). Также получено аналогичное уравнение (значительно более простое) на статистику вещественных функций Грина.

2. Получены общие формулы, связывающие статистику вещественных функций Грина с критерием Андерсона и функцией участия.

3. Построена теория возмущений для вычисления совместной статистики функций Грина гамильтониана (291).

4. Для бинарно разупорядоченной одномерной системы, описывающейся гамильтонианом (291), в котором атомные расщепления ε_r с вероятностью $1 - c$ равны нулю и с вероятностью c равны ε , ($0 < c < 1$) получены следующие выражения для величины D и функции $W(U)$:

$$D = \frac{c}{4\pi} \int_{-2}^2 dU (4 - U^2)^{3/2} \ln \left(\frac{\varepsilon^2}{4 - U^2} + 1 \right) + c \Theta(|\varepsilon| - 1) \left(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \right)^2 + O(c^2) \quad (294)$$

$$W(U) = \frac{c}{4\pi} \Theta(2 - |U|) (4 - U^2)^{3/2} \ln \left(\frac{\varepsilon^2}{4 - U^2} + 1 \right) + c \Theta(|\varepsilon| - 1) \left(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \right)^2 \delta \left(U - \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon} \right) + O(c^2) \quad (295)$$

Неаналитичность (294) как функции ε связана с появлением при $|\varepsilon| > 1$ краевого состояния с энергией $U_0 = (\varepsilon^2 + 1)/\varepsilon$.

5. Для широкого класса разупорядоченных систем, описывающихся гамильтонианом (291), в котором случайные атомные расщепления ε_r имеют функцию распределения вида $P_\Delta(x) = p(x/\Delta)/\Delta$ (где $p(x) > 0$, $\int p(x) dx = 1$, $\int p(x)x dx = 0$, $\int p(x)x^2 dx = M_2$) получены следующие выражения для величины D и функции $W(U)$:

$$D = \frac{\Delta^2 M_2}{2} + O(\Delta^3), \quad W(U) = \Theta(2 - |U|) \frac{\Delta^2 M_2}{4\pi} \sqrt{4 - U^2} + O(\Delta^3) \quad (296)$$

Сравнение этих результатов с данными компьютерного моделирования показывает, что при $D < 0.1$, значащие части формул (294) – (296) дают погрешность меньшую 10%. При этом степень разупорядоченности системы может быть довольно большой, например, значащие части формул (296) оказываются применимыми когда ε_r равномерно распределено в интервале $[-0.25, 0.25]$.

0.5.2 Статистика функций Грина

Нетрудно показать, что средний квадрат модуля волновой функции на краевом узле $\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle$ (с которым интересующая нас величина (292) связана как $D = \langle |\Psi_N(\infty)|^2 \rangle$) может быть вычислен следующим образом:

$$\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle = \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi^2} \int dU_1 dU_2 \exp[i(U_1 - U_2)t] \langle \gamma(U_1 - iV_1) \gamma(U_2 + iV_2) \rangle \quad (297)$$

Где $\gamma(\Omega)$ – краевая функция Грина (КФГ) для гамильтониана (265):

$$\gamma(\Omega) \equiv \sum_{\lambda} \frac{|\Psi_N^{\lambda}|^2}{\Omega - E_{\lambda}} \quad (298)$$

Для вычисления входящего в (297) среднего значения произведения двух функций Грина необходимо знать их совместную функцию распределения. Получим уравнение для этой функции обобщив метод Дайсона [24, 19]. Обозначим через $\gamma(\Omega_i)$, $i = 1, 2$ – краевые функции Грина (298) цепочки при комплексных энергиях $\Omega_1 \equiv U_1 - iV_1$ и $\Omega_2 \equiv U_2 + iV_2$ и добавим к цепочке еще один атом с расщеплением ε . Тогда, как показано в обзорной главе диссертации (см. формулу (60)), КФГ цепочки с добавленным атомом $\tilde{\gamma}(\Omega)$ связана с КФГ исходной цепочки соотношением:

$$\tilde{\gamma}(\Omega) = \frac{1}{\Omega - \varepsilon - \gamma(\Omega)} \quad (299)$$

Для описания краевых функций Грина исходной цепочки $\gamma(\Omega_i)$, $i = 1, 2$ введем функцию распределения η такую, что величина $\eta(x_1, y_1, x_2, y_2) dx_1 dy_1 dx_2 dy_2$, есть вероятность того что $\text{Re } \gamma(\Omega_i) \in [x_i, x_i + dx_i]$ и $\text{Im } \gamma(\Omega_i) \in [y_i, y_i + dy_i]$, $i = 1, 2$. Обозначим $\tilde{\eta}$ аналогичную функцию для цепочки с добавленным атомом. Соотношение (299) позволяет выразить $\tilde{\eta}$ через η и функцию распределения атомных расщеплений $P(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \tilde{\eta}(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1, \tilde{x}_2, \tilde{y}_2) = & \int \delta\left(\tilde{x}_1 - \text{Re} \frac{1}{\Omega_1 - \varepsilon - x_1 - iy_1}\right) \delta\left(\tilde{y}_1 - \text{Im} \frac{1}{\Omega_1 - \varepsilon - x_1 - iy_1}\right) \times \\ & \delta\left(\tilde{x}_2 - \text{Re} \frac{1}{\Omega_2 - \varepsilon - x_2 - iy_2}\right) \delta\left(\tilde{y}_2 - \text{Im} \frac{1}{\Omega_2 - \varepsilon - x_2 - iy_2}\right) \eta(x_1 y_1 x_2 y_2) P(\varepsilon) dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 d\varepsilon \end{aligned} \quad (300)$$

В термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ должно быть $\eta = \tilde{\eta}$. Вычисляя интегралы с δ -функциями в (300), получаем для стационарной функции η следующее уравнение:

$$(x_1^2 + y_1^2)^2 (x_2^2 + y_2^2)^2 \eta(x_1, y_1, x_2, y_2) = \quad (301)$$

$$= \int \eta \left(U_1 - \varepsilon - \frac{x_1}{x_1^2 + y_1^2}, -V_1 + \frac{y_1}{x_1^2 + y_1^2}, U_2 - \varepsilon - \frac{x_2}{x_2^2 + y_2^2}, V_2 + \frac{y_2}{x_2^2 + y_2^2} \right) P(\varepsilon) d\varepsilon$$

При помощи функции η входящее в (297) среднее произведение опережающей и запаздывающей функций Грина можно представить как сумму четырех слагаемых:

$$\begin{aligned} \langle \gamma(\Omega_1) \gamma(\Omega_2) \rangle &= \int \eta(x_1 y_1 x_2 y_2) [x_1 x_2 - y_1 y_2 + \imath(y_1 x_2 + y_2 x_1)] dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \equiv \quad (302) \\ &= \langle x_1 x_2 \rangle - \langle y_1 y_2 \rangle + \imath \langle y_1 x_2 \rangle + \imath \langle y_2 x_1 \rangle \end{aligned}$$

Используя выражение (298), нетрудно убедиться в том, что эти слагаемые можно записать в представлении гамильтониана (291) следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle x_1 x_2 \rangle &= \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} \frac{|\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 (U_1 - E_\lambda)(U_2 - E_{\lambda'})}{[(U_1 - E_\lambda)^2 + V_1^2][(U_2 - E_{\lambda'})^2 + V_2^2]} \right\rangle \quad (303) \\ -\langle y_1 y_2 \rangle &= \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} \frac{|\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 V_1 V_2}{[(U_1 - E_\lambda)^2 + V_1^2][(U_2 - E_{\lambda'})^2 + V_2^2]} \right\rangle \\ \imath \langle y_1 x_2 \rangle &= \imath \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} \frac{|\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 V_1 (U_2 - E_{\lambda'})}{[(U_1 - E_\lambda)^2 + V_1^2][(U_2 - E_{\lambda'})^2 + V_2^2]} \right\rangle \\ \imath \langle x_1 y_2 \rangle &= -\imath \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} \frac{|\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 V_2 (U_1 - E_\lambda)}{[(U_1 - E_\lambda)^2 + V_1^2][(U_2 - E_{\lambda'})^2 + V_2^2]} \right\rangle \end{aligned}$$

Каждому из этих слагаемых соответствует вклад в $\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle$ (297):

$$\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle = \Delta_{\langle x_1 x_2 \rangle} + \Delta_{\langle y_1 y_2 \rangle} + \Delta_{\langle y_1 x_2 \rangle} + \Delta_{\langle x_1 y_2 \rangle}. \quad (304)$$

Для примера приведем вычисление вклада $\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle}$:

$$\begin{aligned} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} &= \frac{\imath}{4\pi^2} \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \int dU_1 dU_2 \exp \imath(U_1 - U_2)t \langle y_2 x_1 \rangle = \quad (305) \\ &= -\frac{\imath}{4\pi^2} \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \int dU_1 dU_2 \exp \imath(U_1 - U_2)t \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} \frac{|\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 V_2 (U_1 - E_\lambda)}{[(U_1 - E_\lambda)^2 + V_1^2][(U_2 - E_{\lambda'})^2 + V_2^2]} \right\rangle = \\ &= \frac{1}{4} \left\langle \sum_{\lambda \lambda'} |\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 \exp \imath(E_\lambda - E_{\lambda'})t \right\rangle \end{aligned}$$

Аналогичные вычисления показывают, что все четыре вклада (304) в $\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle$ равны между собой $\Delta_{\langle x_1 x_2 \rangle} = \Delta_{\langle y_1 y_2 \rangle} = \Delta_{\langle y_1 x_2 \rangle} = \Delta_{\langle x_1 y_2 \rangle}$ и, следовательно:

$$\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle = 4\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} \quad (306)$$

Сделаем следующее важное для дальнейшего замечание. Допустим, что интегрирование по $U_{1,2}$ в формуле (305) проводится только по небольшой области $U_{1,2} \in [U, U + dU]$ и мы

интересуемся поведением вклада $\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle}$ при $t \rightarrow \infty$. В этом случае сумма в последней строке (305) будет содержать только состояния с энергиями $E_\lambda \in [U, U + dU]$. Отсюда видно, что такое ограничение области интегрирования позволяет вычислять функцию "участия" (293).

Таким образом, задача сводится к решению уравнения (301) для функции совместной плотности вероятности η . Тот факт, что при вычислениях вкладов (303) подразумевается предельный переход $V_{1,2} \rightarrow +0$ можно использовать для сведения задачи к исследованию существенно более простого уравнения, чем (301). Для этого заметим, что если $V_1 = V_2 = 0$, то решение (301) можно представить в виде:

$$\eta(x_1, y_1, x_2, y_2) \Big|_{V_{1,2}=0} = \delta(y_1)\delta(y_2)\rho(x_1, x_2), \quad (307)$$

где функция $\rho(x_1, x_2)$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$x_1^2 x_2^2 \rho(x_1, x_2) = \int P(\varepsilon) \rho(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2) d\varepsilon \quad (308)$$

Теперь выполним расчет величины $\langle y_2 x_1 \rangle$, учитывая, что при предельно малых $V_{1,2}$ решение (301) стремится к (307). Поскольку функция η удовлетворяет уравнению (301), для искомого среднего $\langle y_2 x_1 \rangle$ можно написать следующее выражение:

$$\langle y_2 x_1 \rangle = \int \eta(x_1 y_1 x_2 y_2) y_2 x_1 dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 = \quad (309)$$

$$\int \frac{dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 d\varepsilon y_2 x_1}{(x_1^2 + y_1^2)^2 (x_2^2 + y_2^2)^2} \eta \left(U_1 - \varepsilon - \frac{x_1}{x_1^2 + y_1^2}, -V_1 + \frac{y_1}{x_1^2 + y_1^2}, U_2 - \varepsilon - \frac{x_2}{x_2^2 + y_2^2}, V_2 + \frac{y_2}{x_2^2 + y_2^2} \right) P(\varepsilon) =$$

Делая замену переменных:

$$-\frac{x_k}{y_k^2 + x_k^2} \rightarrow x_k, \quad \frac{y_k}{y_k^2 + x_k^2} \rightarrow y_k \quad k = 1, 2 \quad (310)$$

и рассчитывая соответствующие якобианы, можно продолжить равенство (309):

$$= - \int dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 d\varepsilon \eta(U_1 - \varepsilon + x_1, y_1 - V_1, U_2 - \varepsilon + x_2, V_2 + y_2) \frac{x_1}{y_1^2 + x_1^2} \frac{y_2}{y_2^2 + x_2^2}$$

Поскольку при $V_{1,2} \rightarrow +0$ функция η близка к (307), можно считать, что в области, где подынтегральное выражение существенно отлично от нуля, выполняются следующие оценки $y_1 \approx V_1, y_2 \approx -V_2$, причем точность оценок увеличивается в пределе $V_{1,2} \rightarrow +0$. В этом пределе $y_2/y_2^2 + x_2^2 \rightarrow -\pi\delta(x_2)$, а $y_1 \rightarrow +0$. Имея это в виду, можно выполнить

интегрирование по x_2 , после чего подставить вместо функции η ее предельное выражение (307) и окончательно получить:

$$\langle y_2 x_1 \rangle = \pi \int d\varepsilon \frac{dx}{x} \rho(U_1 - \varepsilon + x, U_2 - \varepsilon) P(\varepsilon), \quad (311)$$

причем интеграл понимается в смысле главного значения. Аналогичные вычисления можно проделать для $\langle y_1 x_2 \rangle$, $\langle y_1 y_2 \rangle$ и $\langle x_1 x_2 \rangle$.

Наконец отметим еще следующее важное обстоятельство. Из выражения (305) видно, что если $\langle y_2 x_1 \rangle$ не имеет сингулярности при $U_2 - U_1 \equiv \omega = 0$, то $\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} = 0$. Поэтому ненулевое значение D связано с появлением сингулярности величины $\langle y_2 x_1 \rangle$ при $\omega = 0$. Таким образом, для вычисления величины D достаточно решить уравнение (308) при малых разностях ω энергий, выделить в этом решении сингулярную часть и с ее помощью определить предельное при $t \rightarrow \infty$ поведение интеграла в (305). Этому посвящены следующие разделы.

0.5.3 Бинарный беспорядок

В случае бинарного беспорядка, о котором шла речь в первом разделе, функция распределения атомных расщеплений имеет вид:

$$P(y) = (1 - c)\delta(y) + c\delta(y - \varepsilon), \quad 0 < c < 1 \quad (312)$$

а уравнение (308) записывается следующим образом:

$$x_1^2 x_2^2 \rho(x_1 x_2) = (1 - c)\rho(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) + c\rho(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2) \quad (313)$$

Представим функцию ρ в виде ряда по степеням c :

$$\rho = \sum_{n=0}^{\infty} c^n \rho_n \quad (314)$$

Подставляя этот ряд в (313) и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях c получаем:

$$c^0: \quad \rho_0(x_1 x_2) x_1^2 x_2^2 = \rho_0(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) \quad (315)$$

$$c^1: \quad \rho_1(x_1 x_2) x_1^2 x_2^2 = \rho_1(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) + \quad (316)$$

$$+ \rho_0(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2) - \rho_0(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2), \quad \text{и т.д.}$$

Для расчета величины D с точностью до членов $\sim c^2$ достаточно рассчитать с этой точностью среднее (311). Подставляя туда функции (312 и (314), получим:

$$\langle y_2 x_1 \rangle = \pi \int \frac{dx}{x} \left\{ (1-c)\rho_0(U_1+x, U_2) + c\rho_0(U_1-\varepsilon+x, U_2-\varepsilon) + c\rho_1(U_1+x, U_2) \right\} + O(c^2) \quad (317)$$

Первое слагаемое в фигурных скобках с точностью до множителя $1-c$ дает значение среднего $\langle y_2 x_1 \rangle$ для случая полностью упорядоченной цепочки когда $D = 0$ и интереса для нас не представляет. Таким образом, для интересующей нас сингулярной части $\langle y_2 x_1 \rangle$ (обозначим ее символом sing) и предельного при $t \rightarrow \infty$ значения $\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle}$ получаем следующие выражения:

$$\text{sing}\langle y_2 x_1 \rangle = c\pi \int \frac{dx}{x} \left\{ \rho_0(U_1 - \varepsilon + x, U_2 - \varepsilon) + \rho_1(U_1 + x, U_2) \right\} + O(c^2) \quad (318)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} = \frac{i}{4\pi^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int dU_1 dU_2 \exp i(U_1 - U_2)t \text{sing}\langle y_2 x_1 \rangle$$

Для определения входящих в (318) функций ρ_0 и ρ_1 необходимо решить уравнения (315) и (316). Мы начнем анализ этих уравнений с особенно важного случая, когда $|U_{1,2}| < 2$, т.е. когда энергии обеих функций Грина попадают в спектр гамильтониана (291) при $\varepsilon_r = 0$.

Вклад области $|U_{1,2}| < 2$

Прямая подстановка показывает, что в этом случае решение уравнения (315) для ρ_0 может быть представлено в явном виде:

$$\rho_0(x_1 x_2) = \mathcal{L}_{U_1}(x_1) \mathcal{L}_{U_2}(x_2), \quad (319)$$

где $\mathcal{L}_U(x)$ – лорентциан:

$$\mathcal{L}_U(x) = \frac{\sqrt{4-U^2}}{2\pi} \frac{1}{x^2 - Ux + 1} \quad (320)$$

Перейдем теперь к уравнению (316), решение которого при $|U_{1,2}| < 2$ будем строить в виде разложения по предложенной автором в [33] системе специальных функций. Приведем полученные в [33] результаты. Введем зависящий от параметра $U, |U| < 2$ линейный оператор \mathcal{H}_U , который осуществляет в функции, на которую он действует, замену переменной $x \rightarrow U - 1/x$ и делит эту функцию на x^2 :

$$\mathcal{H}_U f(x) \equiv \frac{1}{x^2} f(U - 1/x) \quad (321)$$

Как показано в [33], собственные функции $\sigma_U^{(n)}(x)$ и собственные числа λ_n этого оператора нумеруются целым числом n и определяются соотношениями:

$$\sigma_U^{(n)}(x) = \mathcal{L}_U(x) \left[\frac{R^* - x}{R - x} \right]^n \equiv \mathcal{L}_U(x) G^n(x), \quad \lambda_n = \left(\frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{U - i\sqrt{4 - U^2}} \right)^n, \quad |\lambda_n| = 1 \quad (322)$$

где

$$R = \frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{2}, \quad R^* = \frac{U - i\sqrt{4 - U^2}}{2}, \quad RR^* = 1$$

Отображение осуществляемое оператором \mathcal{H}_U фигурирует в уравнениях (315),(316), поэтому решения этих уравнений будем искать в виде ряда по функциям (322). Для этого используем полученные в [33] правила разложения произвольной функции $f(x)$ по функциям (322):

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \sigma_U^{(n)}(x) \quad (323)$$

причем коэффициенты A_n определяются формулами:

$$A_n = \int \frac{f(x)}{G^n(x)} dx \quad (324)$$

Представим $\rho_1(x_1 x_2)$ в виде ряда по функциям (322):

$$\rho_1(x_1 x_2) = \sum_{|n|+|m| \neq 0} C_{nm} \sigma_{U_1}^{(n)}(x_1) \sigma_{U_2}^{(m)}(x_2) \quad (325)$$

Подставляя ряд (325) в уравнение (316) и пользуясь свойствами функций (322), получим:

$$\begin{aligned} & \sum_{|n|+|m| \neq 0} C_{nm} \sigma_{U_1}^{(n)}(x_1) \sigma_{U_2}^{(m)}(x_2) [1 - \lambda_n(U_1) \lambda_m(U_2)] = \\ & = \frac{\rho_0(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2)}{x_1^2 x_2^2} - \mathcal{L}_{U_1}(x_1) \mathcal{L}_{U_2}(x_2) \end{aligned} \quad (326)$$

Раскладывая с помощью (323) и (324) правую часть этого уравнения по функциям (322), получим для коэффициентов разложения ρ_1 следующие выражения:

$$C_{nm} = \frac{J_n(U_1, \varepsilon) J_m(U_2, \varepsilon)}{1 - \lambda_n(U_1) \lambda_m(U_2)} \quad (327)$$

где функции $J_n(U, \varepsilon)$ определяются как:

$$J_n(U, \varepsilon) \equiv \int \frac{\mathcal{L}_U(U - \varepsilon - 1/x) dx}{G^n(x) x^2} = \lambda_n(U) \int \frac{\mathcal{L}_U(x - \varepsilon)}{G^n(x)} dx, \quad (328)$$

мы здесь воспользовались $G(1/(U - \theta)) = G(\theta)/\lambda_1$ [33]. Имеют место соотношения:

$$J_n(U, 0) = 0 \quad \text{при } n \neq 0, \quad J_n(U, \varepsilon) = J_{-n}^*(U, \varepsilon) \Rightarrow |J_n(U, \varepsilon)|^2 = |J_{-n}^*(U, \varepsilon)|^2 \quad (329)$$

Таким образом, решение уравнения (316) для ρ_1 имеет вид:

$$\rho_1(x_1 x_2) = \sum_{|n|+|m| \neq 0} \frac{J_n(U_1, \varepsilon) J_m(U_2, \varepsilon)}{1 - \lambda_n(U_1) \lambda_m(U_2)} \sigma_{U_1}^{(n)}(x_1) \sigma_{U_2}^{(m)}(x_2) \quad (330)$$

Как было отмечено выше, для вычисления величины D нам необходима только сингулярная при $\omega = U_2 - U_1 \approx 0$ часть этого выражения. Нетрудно видеть, что особенность при $\omega = 0$ имеют только те члены суммы (330), у которых $m = -n$. Сделаем следующую замену символов: $U_1 \rightarrow U, U_2 \rightarrow U + \omega$ и запишем выражение для знаменателя этих членов с точностью до членов $\sim \omega^2$:

$$1 - \lambda_n(U) \lambda_{-n}(U + \omega) = -\frac{2in\omega}{\sqrt{4 - U^2}} + O(\omega^2) \quad (331)$$

Принимая это во внимание, получаем для сингулярной части (330) выражение:

$$\text{sing } \rho_1(x_1 x_2) = \frac{i\sqrt{4 - U^2}}{2\omega} \sum_{n \neq 0} \frac{|J_n(U, \varepsilon)|^2}{n} \sigma_U^{(n)}(x_1) \sigma_U^{-n}(x_2) \quad (332)$$

Обратимся теперь к формуле (318). Нетрудно видеть, что первое слагаемое под интегралом при $|U_{1,2}| < 2$ не дает вклада в силу регулярности функции ρ_0 (319) при $\omega = 0$. Поэтому нам нужно рассмотреть только вклад второго слагаемого, зависящего от функции ρ_1 :

$$\begin{aligned} \text{sing} \langle y_2 x_1 \rangle &= \text{sing } \pi c \int \frac{dx}{x} \rho_1(U + x, U + \omega) = \\ &= i\pi c \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\omega} \sum_{n \neq 0} \frac{|J_n(U, \varepsilon)|^2}{n} \sigma_U^{-n}(U) \int \frac{dx}{x} \sigma_U^{(n)}(U + x) = \\ &= ic \frac{4 - U^2}{4\omega} \sum_{n \neq 0} \frac{|J_n(U, \varepsilon)|^2}{n} \int dx x \sigma_U^{(n)}(x) \end{aligned} \quad (333)$$

При преобразовании подынтегрального выражения мы сделали замену переменной $x \rightarrow -1/x$ и воспользовались тем, что функции $\sigma_U^{(n)}(x)$ являются собственными для оператора \mathcal{H}_U (321). Теперь можно вычислить предельное при $t \rightarrow \infty$ поведение вклада (305):

$$\begin{aligned} &\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} \Big|_{|U_{1,2}| < 2} = \\ &= -\frac{c}{16\pi^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int \frac{\exp i\omega t}{\omega} d\omega \int_{-2}^2 dU (4 - U^2) \sum_{n \neq 0} \frac{|J_n(U, \varepsilon)|^2}{n} \int dx x \sigma_U^{(n)}(x) \end{aligned} \quad (334)$$

Предельное при $t \rightarrow \infty$ поведение первого интеграла не зависит от области интегрирования по ω :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int \frac{\exp i\omega t}{\omega} d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp ix}{x} dx = i\pi \quad (335)$$

Вычисление первого момента функций $\sigma^{(n)}(x)$ и интегралов (328) приводит к следующим выражениям:

$$\int dx x \sigma_U^{(n)}(x) = \frac{i}{2} \frac{n}{|n|} \sqrt{4 - U^2}, \quad |J_n(U, \varepsilon)|^2 = \left(\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + 4 - U^2} \right)^n \quad (336)$$

Таким образом, формула (334) может быть преобразована так:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} \Big|_{|U_{1,2}| < 2} = \frac{c}{16\pi} \int_{-2}^2 dU (4 - U^2)^{3/2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left(\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + 4 - U^2} \right)^n + O(c^2) \quad (337)$$

И, пользуясь тем, что $\sum_{n=1}^{\infty} q^n/n = -\ln(1 - q)$, получаем:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} \Big|_{|U_{1,2}| < 2} = \frac{c}{16\pi} \int_{-2}^2 dU (4 - U^2)^{3/2} \ln \left(\frac{\varepsilon^2}{4 - U^2} + 1 \right) + O(c^2) \quad (338)$$

Вклад области $|U_{1,2}| > 2$

Вернемся к формулам (318) и рассмотрим вклад в фигурирующий там интеграл области $|U_{1,2}| > 2$. В Приложении 1 приведен детальный анализ этой области энергий. Мы здесь исследуем вклад первого слагаемого в фигурных скобках формулы (318) зависящего от ρ_0 , который (как это показано в Приложении 1) является доминирующим при $|U_{1,2}| > 2$. Поскольку выражение для КФГ упорядоченной цепочки известно,²⁷ решение уравнения (315) для невозмущенной функции совместной плотности вероятности ρ_0 при $|U_{1,2}| > 2$ несложно угадать:

$$\rho_0(x_1 x_2) = \delta \left[x_1 - \frac{U_1 - \text{sign}(U_1) \sqrt{U_1^2 - 4}}{2} \right] \delta \left[x_2 - \frac{U_2 - \text{sign}(U_2) \sqrt{U_2^2 - 4}}{2} \right] \quad (339)$$

Рассчитаем теперь вклад связанного с ρ_0 первого слагаемого в фигурных скобках (318) (обозначим его I_1):

$$I_1 = \frac{ic}{4\pi} \int \frac{dx dU_1 dU_2}{x} \exp[i(U_1 - U_2)t] \rho_0(U_1 - \varepsilon + x, U_2 - \varepsilon)$$

²⁷ Оно получается решением уравнения (299) при $\tilde{\gamma} = \gamma, \varepsilon = 0$

$$I_1 = \frac{ic}{4\pi} \int \frac{dx dU_1 dU_2}{x} \exp[i(U_1 - U_2)t] \delta \left[x - \varepsilon + \frac{U_1 + \text{sign}(U_1)\sqrt{U_1^2 - 4}}{2} \right] \times \quad (340)$$

$$\times \delta \left[\frac{U_2 + \text{sign}(U_2)\sqrt{U_2^2 - 4}}{2} - \varepsilon \right]$$

Здесь интегралы по $U_{1,2}$ берутся по области $|U_{1,2}| > 2$. Интегрируя (340) по x , получаем:

$$I_1 = \frac{ic}{4\pi} \int \frac{dU_1 dU_2 \exp i(U_1 - U_2)t}{\varepsilon - [U_1 + \text{sign}(U_1)\sqrt{U_1^2 - 4}]/2} \delta \left[\frac{U_2 + \text{sign}(U_2)\sqrt{U_2^2 - 4}}{2} - \varepsilon \right] \quad (341)$$

Ясно, что результат не зависит от знака ε и ниже для определенности будем считать, что $\varepsilon > 0$. В этом случае второй сомножитель под интегралом в (341) при $U_2 < -2$ равен нулю, а при $0 < \varepsilon < 1$ равен нулю тождественно. Следовательно, рассчитываемый вклад отличен от нуля только при $|\varepsilon| > 1$. Подынтегральные функции в (341) имеют δ -особенность при интегрирование по U_2 и особенность типа полюса при интегрирование по U_1 . Для вычисления этих интегралов (при $t \rightarrow \infty$) примем во внимание, что фигурирующая в них функция $\Phi(U)$, определенная как:

$$\Phi(U) \equiv \frac{U + \sqrt{U^2 - 4}}{2} - \varepsilon \quad (342)$$

обращается в нуль при

$$U = U_0 \equiv \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon} \quad (343)$$

и может быть разложена в ряд при $U \approx U_0$:

$$\Phi(U) \approx (U - U_0) \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 - 1} \quad (344)$$

Используя эту формулу, вычисляем входящий в (341) интеграл по U_2 :

$$\int dU_2 \exp[-iU_2 t] \delta \left[\frac{U_2 + \sqrt{U_2^2 - 4}}{2} - \varepsilon \right] = \frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \exp[-iU_0 t] \quad (345)$$

Займемся теперь интегралом по U_1 в (341). Поскольку его надо вычислить при $t \rightarrow \infty$, ненулевым будет только вклад полюса подынтегрального выражения. Опять используя разложение (344), получаем для этого интеграла следующее выражение:

$$\int_{U_1 > 2} \frac{dU_1 \exp[iU_1 t]}{\varepsilon - [U_1 + \sqrt{U_1^2 - 4}]/2} \approx -\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dU_1 \exp[iU_1 t]}{U_1 - U_0} = -i\pi \exp[iU_0 t] \frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \quad (346)$$

Здесь приближенное равенство становится точным в пределе $t \rightarrow \infty$, который нас как раз и интересует. Таким образом

$$I_1 = \Theta(|\varepsilon| - 1) \frac{c}{4} \left(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \right)^2 \quad (347)$$

Дополнительное исследование (на котором мы не останавливаемся) показывает, что этот вклад связан с появлением при $|\varepsilon| > 1$ краевого состояния, имеющего энергию U_0 , определяемую формулой (343). Для получения окончательной формулы для величины D вклады (347) и (338) следует сложить и, в соответствии с (306), учетверить результат. Таким образом, для величины D в рассматриваемом случае бинарного беспорядка получается формула (294). В соответствии с логикой ее вывода и замечанием, приведенном после формулы (305), вид функции "участия" $W(U)$ введенной в первом разделе определяется выражением (295).

0.5.4 Произвольный малый диагональный беспорядок

Проделанный выше анализ бинарно-разупорядоченной цепочки представляет собой последовательную теорию возмущений для статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, в которой роль малого параметра играет средняя концентрация c атомов с расщеплением ε . Аналогично может быть построена теория возмущений для цепочки с беспорядком достаточно общего вида, причем параметр малости вводится следующим образом. Пусть функция $p(\varepsilon)$ такая, что $p(\varepsilon) > 0$, $\int p(\varepsilon) d\varepsilon = 1$. С помощью этой функции построим следующее семейство функций распределения атомных расщеплений $P_\Delta(\varepsilon)$:

$$P_\Delta(\varepsilon) = \frac{1}{\Delta} p\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right) \quad (348)$$

Если определить моменты функции $p(\varepsilon)$ как:

$$M_n \equiv \int p(\varepsilon) \varepsilon^n d\varepsilon \quad (349)$$

то моменты функций (348) могут быть выражены через них следующим образом:

$$\int P_\Delta(\varepsilon) \varepsilon^n d\varepsilon = \Delta^n M_n \quad (350)$$

Ясно, что Δ есть мера разупорядоченности системы – при $\Delta \rightarrow 0$ система становится упорядоченной. Без потери общности можно считать, что $M_1 = 0$. Таким образом, нужно

построить теорию возмущений для уравнения (308) при $P(\varepsilon) = P_\Delta(\varepsilon)$, где бы малым параметром была величина Δ . Будем строить разложение решения (308) по степеням Δ и проделаем вычисления для особенно важного случая $|U_{1,2}| < 2$. Для этого напишем разложение функции $\rho(x_1x_2)$ в окрестности некоторой точки x_{10}, x_{20} :

$$\rho(x_1x_2) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \rho_{nm}(x_1 - x_{10})^n(x_2 - x_{20})^m, \quad \rho_{nm} \equiv \frac{1}{n!m!} \frac{\partial^{n+m}}{\partial\theta_1^n \partial\theta_2^m} \rho(\theta_1\theta_2) \Big|_{\theta_i=x_{i0}} \quad (351)$$

Применяя это разложение в правой части (308) и полагая $x_{i0} = U_i - 1/x_i, i = 1, 2$, можно получить разложение фигурирующей там функции $\rho(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2)$ по степеням ε и выразить правую часть (308) через моменты (349) и степени Δ :

$$\int d\varepsilon P_\Delta(\varepsilon) \rho(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2) = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{(-\Delta)^{n+m} M_{n+m}}{n!m!} \frac{\partial^{n+m} \rho(\theta_1\theta_2)}{\partial\theta_1^n \partial\theta_2^m} \Big|_{\theta_1=U_1-1/x_1}^{\theta_2=U_2-1/x_2} \quad (352)$$

Отсюда следует, что и левая часть (308) (т.е. сама функция $\rho(x_1x_2)$) допускает разложение по степеням Δ , которое мы запишем в виде:

$$\rho(x_1x_2) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \Delta^k Q_k(x_1x_2), \quad (353)$$

Уравнение (308) позволяет выразить функции Q_n через $Q_m, m < n$. Для этого подставим разложения (352) и (353) в (308). Получим

$$x_1^2 x_2^2 \sum_{k=0}^{\infty} \Delta^k Q_k(x_1x_2) = \sum_{n,m,k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} \Delta^{n+m+k} M_{n+m}}{n!m!} \frac{\partial^{n+m}}{\partial\theta_1^n \partial\theta_2^m} Q_k(\theta_1\theta_2) \Big|_{\theta_i=U_i-1/x_i} \quad (354)$$

Приравнивание коэффициентов при Δ^0 дает:

$$x_1^2 x_2^2 Q_0(x_1x_2) = Q_0(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) \quad (355)$$

Отсюда аналогично (319) получаем следующее выражение для $Q_0(x_1x_2)$

$$Q_0(x_1x_2) = \rho_0(x_1x_2) = \mathcal{L}_{U_1}(x_1) \mathcal{L}_{U_2}(x_2) \quad (356)$$

Нетрудно убедиться в том, что равенство нулю первого момента $M_1 = 0$ приводит к тому, что $Q_1(x_1x_2) = 0$. Приравнивание коэффициентов при Δ^2 дает:

$$x_1^2 x_2^2 Q_2(x_1x_2) = Q_2(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) + M_2 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta_1 \partial\theta_2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial\theta_1^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial\theta_2^2} \right] Q_0(\theta_1\theta_2) \Big|_{\theta_i=U_i-1/x_i} \quad (357)$$

Вычислим теперь с точностью до членов $\sim \Delta^3$ величину $\langle y_2 x_1 \rangle$, определяемую формулой (311) при $P(\varepsilon) = P_\Delta(\varepsilon)$. Для фигурирующего там интеграла используем разложения (352) и (353):

$$\int d\varepsilon P_\Delta(\varepsilon) \rho(U_1 - \varepsilon + x, U_2 - \varepsilon) = \int d\varepsilon P_\Delta(\varepsilon) \sum_{n,m,k=0}^{\infty} \frac{(-\varepsilon)^{n+m} \Delta^k}{n!m!} \frac{\partial^{n+m} Q_k(\theta_1\theta_2)}{\partial\theta_1^n \partial\theta_2^m} \Big|_{\theta_1=U_1+x}^{\theta_2=U_2} = \quad (358)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n,m,k=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n+m} \Delta^{n+m+k} M_{n+m}}{n!m!} \frac{\partial^{n+m} Q_k(\theta_1 \theta_2)}{\partial \theta_1^n \partial \theta_2^m} \Big|_{\theta_1=U_1+x}^{\theta_2=U_2} = Q_0(U_1+x, U_2) + \\
&\Delta^2 \left[Q_2(U_1+x, U_2) + M_2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta_1 \partial \theta_2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_1^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta_2^2} \right) Q_0(\theta_1 \theta_2) \Big|_{\theta_1=U_1+x}^{\theta_2=U_2} \right] + O(\Delta^3)
\end{aligned}$$

Здесь первый член нулевого порядка по Δ соответствует цепочке без беспорядка и поэтому не дает вклада в интересующую нас величину D . Для расчета вклада в величину D первого члена в квадратных скобках (назовем его A -вкладом) необходима функция $Q_2(x_1 x_2)$, которая находится из уравнения (357). Решение этого уравнения при $|U_{1,2}| < 2$ выполняется также, как и решение уравнения (316), и сводится к следующему переопределению величин $J_n(U)$:

$$J_n(U) \equiv \int \frac{dx}{x^2 G^n(x)} \frac{\partial \mathcal{L}_U(\theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=U-1/x} \quad J_n(U) = J_{-n}^*(U) \quad (359)$$

Делая в этих интегралах замену переменной $\theta = U - 1/x$ и пользуясь тем, что функция $G(\theta)$ (322) имеет следующее свойство: $G(1/(U - \theta)) = G(\theta)/\lambda_1$ [33], получаем:

$$J_n(U) = \lambda_n \int \frac{d\mathcal{L}_U(x)}{dx} \frac{dx}{G^n(x)} \quad (360)$$

Вычисление этих интегралов показывает, что отличными от нуля будут только $J_{\pm 1}(U)$:

$$J_{\pm 1}(U) = \mp \frac{i\lambda_1}{\sqrt{4-U^2}}, \quad |J_{\pm 1}(U)|^2 = \frac{1}{4-U^2} \quad (361)$$

Имея это ввиду уже нетрудно убедиться, в том что A -вклад из (358) при $|U_{1,2}| < 2$ будет таким:

$$\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} (t \rightarrow \infty) \Big|_{A\text{-вклад}} = \frac{\Delta^2 M_2}{16\pi} \int_{-2}^2 \sqrt{4-U^2} dU = \frac{\Delta^2 M_2}{8} \quad (362)$$

В случае $U_{1,2} > 2$ анализ уравнения (357) аналогичный приведенному в Приложении показывает, что A -вклад равен нулю.

Рассмотрим теперь вклад в величину D второго члена в квадратных скобках (358) – назовем его B -вкладом. Для этого вклада область $U_{1,2} < 2$ не играет роли при вычислении предельного при $t \rightarrow \infty$ поведения $\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle}$ поскольку в этом случае под интегралами стоят функции, не имеющие особенностей при $U_1 = U_2$. При $|U_{1,2}| > 2$ B -вклад из (358) имеет вид:

$$\Delta_{\langle y_2 x_1 \rangle} \Big|_{B\text{-вклад}} = M_2 \Delta^2 \pi \int \frac{dx}{x} \frac{d}{dx} \delta \left(x + \frac{U_1 + \text{sign}(U_1) \sqrt{U_1^2 - 4}}{2} \right) \times \quad (363)$$

$$\times \frac{d}{dy} \delta \left(y + \frac{U_2 + \text{sign}(U_2) \sqrt{U_2^2 - 4}}{2} \right) \exp i(U_1 - U_2)t \Big|_{y=0}^{t \rightarrow \infty} + \dots$$

Для сокращения записи мы привели здесь только член со смешанными производными – оставшиеся члены анализируются также. Поскольку аргумент второй δ -функции никогда не обращается в нуль (при $|U_2| > 2$), мы приходим к заключению, что B -вклад равен нулю и, учетверяя результат (362), приходим к формулам (296).

0.5.5 Численный эксперимент

Полученные выше формулы (294) – (296) могут быть проверены расчетами величины D и функции $W(U)$ по формулам (292) и (293), в которых собственные векторы Ψ^λ и собственные энергии E_λ получены прямой компьютерной диагонализацией гамильтониана (291). Ниже мы приводим результаты такой проверки, причем зашумленные кривые получены численно, а гладкие – с помощью формул (294) – (296). На рис.21а для бинарно разупорядоченной цепочки представлены зависимости величины D/c от энергии дефекта ε , полученные численно для разных концентраций дефектов c , и соответствующая теоретическая зависимость (294). Видно, что, когда D/c не зависит от c , формула (294) полностью описывает численные кривые, на которых хорошо заметен изгиб при $\varepsilon = 1$, описываемый неаналитическим членом в (294). На рис.21б представлена зависимость величины D от степени разупорядоченности Δ для случая равномерного беспорядка, когда функция распределения атомных расщеплений берется в виде (348), причем $p(x) = \Theta(0.5 - |x|)$. Из этого рисунка видно, что формула (296) хорошо описывает численный эксперимент даже при относительно большом беспорядке.

На рис.22 представлены энергетические зависимости функций участия $W(U)dU$, полученные численно с помощью формулы (293) и рассчитанные теоретически по формулам (295) (бинарный беспорядок) и (296) (равномерный беспорядок). Рис.22 (а,б) относятся к случаю бинарно разупорядоченной системе с концентрацией дефектов $c = 0.03$, причем рис.22а соответствует энергии дефекта $\varepsilon = 0.8$, а рис.22б – $\varepsilon = 1.2$. Из этих рисунков видно, что при $\varepsilon > 1$ функция "участия" $W(U)$ демонстрирует резкий максимум при $U = U_0$ (343). Рис.22в соответствует цепочке с довольно большим ($\Delta = 0.5$) равномерным беспорядком. Как видно из рисунка, и в этом случае имеется хорошее согласие теории и

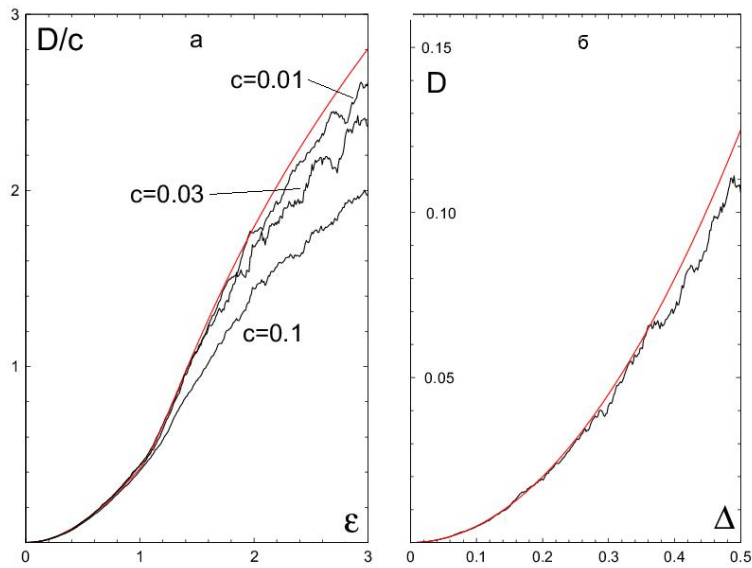


Рис. 21: (а) Случай бинарного беспорядка. Зашумленные кривые – зависимости величины D/c от энергии дефектов ϵ , полученные численно при разных концентрациях дефектов $c = 0.01, 0.03, 0.1$, гладкая кривая – теоретическая зависимость. (б): Случай равномерного беспорядка. Зависимость предельной при $t \rightarrow \infty$ плотности возбуждения D на крайнем узле от величины беспорядка Δ .

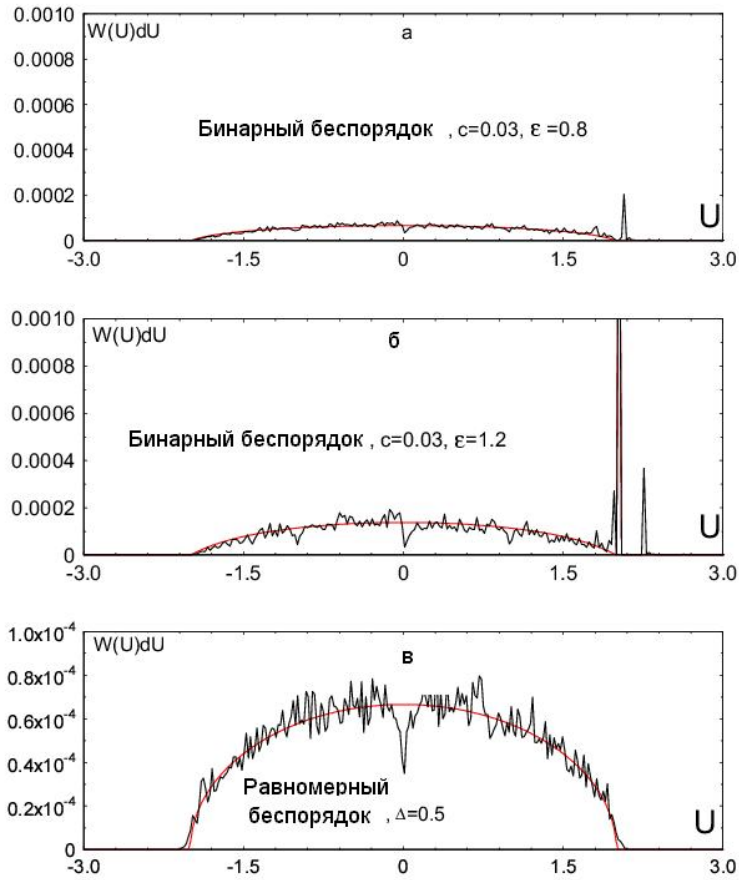


Рис. 22: Функция участия: сравнение теории (гладкие кривые) с компьютерным моделированием (зашумленные кривые). Для бинарно разупорядоченной цепочки видно появление особенности, связанной с краевым состоянием: (а) – $\epsilon = 0.8 < 1$, особенность выражена слабо, (б) – $\epsilon = 1.2 > 1$, появляется высокий узкий пик функции участия. (в) – функция участия для цепочки с равномерным беспорядком при $\Delta = 0.5$. Во всех случаях $dU = 1/50$.

численного эксперимента, однако, для описания заметного провала в центре "экспериментальной" зависимости требуется, по-видимому, учет поправок более высокого порядка чем Δ^2 . При численном моделировании не применялось никакой подгонки.

Заметим, что для получения численных зависимостей рис.21 можно использовать небольшие матрицы ($N \sim 100$) и вычислять D как $|\Psi_N(t \sim 50 - 100)|^2$, проверяя ²⁸ отсутствие зависимости результатов от t и N . Для получения численных зависимостей для рис.22 мы использовали матрицы размером 2000×2000 с последующим усреднением по 1000 реализациям беспорядка.

В заключении сделаем следующее замечание. Появление неаналитичности в зависимости D от энергий дефекта (294) свидетельствует о невозможности анализа бинарно разупорядоченной цепочки в рамках обычной квантово-механической теории возмущений при произвольной энергии дефектов ε . С другой стороны, простой аналитический вид формул (296) для *слабо разупорядоченной* системы дает основания думать, что для *этого* случая такой анализ возможен. Предложенная схема теории возмущений для статистики функций Грина позволяет рассмотреть эти две разнородные задачи с единой точки зрения.

²⁸При небольших N $|\Psi_N(t)|^2$ обнаруживает квазициклическое поведение, поэтому величину t следует брать меньшей времени цикла.

0.5.6 Приложение 1

Для последовательного анализа спектральной области $|U_{1,2}| > 2$ необходимо получить решение уравнения (316) и найти ρ_1 в этой спектральной области. Будем для определенности считать, что $U_{1,2} > 2$ и введем следующие величины:

$$\gamma_U \equiv \frac{U - \sqrt{U^2 - 4}}{2}, \quad \gamma'_U = \gamma'_U(\varepsilon) \equiv \frac{1}{U - \gamma_U - \varepsilon}, \quad (364)$$

причем γ_U является КФГ цепочки без беспорядка. Как уже было сказано, в рассматриваемом случае $U_{1,2} > 2$ решение (315) дает для функции ρ_0 следующее выражение (339):

$$\rho_0(x_1 x_2) = \delta(x_1 - \gamma_{U_1}) \delta(x_2 - \gamma_{U_2}) \quad (365)$$

Тогда (316) можно переписать так:

$$\rho_1(x_1 x_2) - \frac{\rho_1(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2)}{x_1^2 x_2^2} = \delta(x_1 - \gamma'_{U_1}) \delta(x_2 - \gamma'_{U_2}) - \delta(x_1 - \gamma_{U_1}) \delta(x_2 - \gamma_{U_2}) \quad (366)$$

Непосредственной подстановкой проверяется, что решение уравнения (366) имеет вид:²⁹

$$\rho_1(x_1 x_2) = \sum_{i=0}^{\infty} \left\{ \delta(x_1 - \theta_i(U_1)) \delta(x_2 - \theta_i(U_2)) - \delta(x_1 - \gamma_{U_1}) \delta(x_2 - \gamma_{U_2}) \right\} \quad (367)$$

где величины $\theta_i(U)$ определяются рекуррентными соотношениями:

$$\theta_0(U) = \gamma'_U, \quad \theta_{n+1}(U) = \frac{1}{U - \theta_n(U)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (368)$$

Будем использовать для расчета предельной при $t \rightarrow \infty$ плотности D и функции участия $W(U)$ следующую, вытекающую из соотношений (305 – 311), формулу:

$$D = \frac{i}{\pi^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int dU d\omega e^{-i\omega t} \langle y_2 x_1 \rangle, \quad \text{где } \langle y_2 x_1 \rangle = \pi \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int dx x \rho_{U, U+\omega}(x, a) \quad (369)$$

здесь $\rho_{U, U+\omega}(x_1 x_2)$ – совместная статистика функций Грина. Комбинируя эти соотношения, получаем для D следующее выражение:

$$D = \frac{i}{\pi} \lim_{t, a \rightarrow \infty} a^2 \int dU d\omega dx e^{-i\omega t} x \rho_{U, U+\omega}(x, a) \quad (370)$$

Это выражение для критерия Андерсона через совместную статистику ρ функций Грина имеет общий характер и, по-видимому, является наиболее удобным. Подставляя в него

²⁹Ряд, написанный ниже, сходится в смысле интеграла с какой-либо регулярной функцией.

выражение для первой поправки ρ_1 (367), получаем для вклада области $U > 2$ (обозначим его символом D_+), следующую формулу:

$$D_+ = \frac{\imath c}{\pi} \lim_{t, a \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} a^2 \int dU d\omega dx e^{-\imath \omega t} x \left\{ \delta(x - \theta_i(U_1)) \delta(a - \theta_i(U_2)) - \delta(x - \gamma_{U_1}) \delta(a - \gamma_{U_2}) \right\} + O(c^2)$$

(Здесь $U_1 = U, U_2 = U + \omega$ и интегрирование по U идет по области $U > 2$) Второе произведение дельта функций, стоящих в фигурных скобках этой формулы, не дает вклада, поскольку для того чтобы функция $\delta(a - \gamma_{U_2})$ отличалась от нуля при $a \rightarrow \infty$, необходимо чтобы γ_{U_2} (364) обращалась в бесконечность при каком-либо $U_2 > 2$, чего не может быть. Поэтому второе произведение дельта функций можно отбросить. Тогда, заменяя символы $U_1 = U, U_2 = U + \omega$, получаем, что

$$\begin{aligned} D_+ &= \frac{\imath c}{\pi} \lim_{t, a \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} a^2 \int dU d\omega dx e^{-\imath \omega t} x \left\{ \delta(x - \theta_i(U)) \delta(a - \theta_i(U + \omega)) \right\} + O(c^2) = \\ &= \frac{\imath c}{\pi} \lim_{t, a \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} a^2 \int dU d\omega e^{-\imath \omega t} \theta_i(U) \delta(a - \theta_i(U + \omega)) + O(c^2) \end{aligned} \quad (371)$$

Здесь дельта-функции в последней строке отличны от нуля только при $\theta_i(U + \omega) \rightarrow \infty$, т.е. вблизи полюсов функций $\theta_i(U + \omega)$. Обозначим точку полюса функции $\theta_i(U)$ через u_i . Тогда при $U \approx u_i$ имеет место разложение

$$\theta_i(U) \approx \frac{b_i}{U - u_i}$$

Мы допускаем сейчас, что полюс у каждой функции $\theta_i(U)$ только один – мы увидим ниже, что это действительно имеет место. Таким образом, при больших a входящие в (371) дельта-функции можно записать так:

$$\delta(a - \theta_i(U + \omega)) = \delta\left(a - \frac{b_i}{U + \omega - u_i}\right) = \frac{b_i}{a^2} \delta\left(U + \omega - \frac{b_i}{a} - u_i\right) \quad (372)$$

после чего предел (371) при $a \rightarrow \infty$ можно взять и получить, что:

$$D_+ = \frac{\imath c}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} \int dU d\omega e^{-\imath \omega t} \theta_i(U) b_i \delta\left(U + \omega - u_i\right) + O(c^2) \quad (373)$$

и далее

$$D_+ = \frac{\imath c}{\pi} \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{\infty} \int dU e^{\imath t(U - u_i)} \theta_i(U) b_i + O(c^2) \quad (374)$$

Напомним, что интегрирование по U здесь идет по области $|U| > 2$, к которой относится наше рассмотрение. Для дальнейшего преобразования (374) рассмотрим это интегрирование по какому-либо небольшому промежутку $[U, U + \Delta U]$, причем $U > 2$. Если u_i не

принадлежит этому промежутку, то

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_U^{U+\Delta U} dU e^{it(U-u_i)} \theta_i(U) = 0$$

поскольку подинтегральная функция не имеет особенностей в интервале интегрирования а частота ее осцилляций неограниченно увеличивается при $t \rightarrow \infty$. Если же $u_i \in [U, U+\Delta U]$, то интеграл становится отличен от нуля, поскольку в него дает вклад область полюса функции $\theta_i(U) \approx b_i/(U - u_i)$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \int_U^{U+\Delta U} dU e^{it(U-u_i)} \theta_i(U) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_U^{U+\Delta U} dU e^{it(U-u_i)} \frac{b_i}{U - u_i} = -i\pi b_i$$

Поэтому в силу того, что интервал ΔU может быть сколь угодно малым, можно сказать, что

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{it(U-u_i)} \theta_i(U) = -i\pi b_i \delta(U - u_i)$$

Имея это ввиду, получаем, что

$$W(U) = c \sum_{i=0}^{\infty} b_i^2 \delta(U - u_i) + O(c^2), \quad (375)$$

$$D_+ = c \int dU \sum_{i=0}^{\infty} b_i^2 \delta(U - u_i) + O(c^2) = \int W(U) dU$$

$$D_+ = c \sum_{i=0}^{\infty} b_i^2 + O(c^2)$$

Сосчитаем в первую очередь величину $\theta_0(U)$ и соответствующий ей вклад в формулы (375). С помощью формул (364) и (368) получаем:

$$\theta_0(U) = \frac{2}{U + \sqrt{U^2 - 4} - 2\varepsilon} \quad (376)$$

Полюс этого выражения соответствует нулю знаменателя, который имеет место при

$$U = u_0 = \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon} \quad (377)$$

Раскладывая знаменатель около этой точки в ряд, получаем, что

$$\theta_0(U) \approx \frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \frac{1}{U - u_0} \quad u_0 = \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon}. \quad \text{Таким образом } b_0 = \frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \quad (378)$$

и формула (375) дает

$$W(U) = c \left(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2} \right)^2 \delta \left(U - \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon} \right) + c \sum_{i=1}^{\infty} b_i^2 \delta(U - u_i) + O(c^2), \quad |U| > 2 \quad (379)$$

Отсюда видно, что вклад от $\theta_0(U)$ соответствует полученной выше формуле (347). Однако, формула (379) показывает, что этот вклад не единственный и необходимо оценить оставшиеся члены ряда (379), чем мы сейчас и займемся.

Определим положения δ -особенностей всех остальных членов суммы (375). Из (368) видно, что функции $\theta_i(U)$, полюса которых и определяют указанные особенности, получаются последовательным применением преобразования (368) $\theta_{i+1} = 1/[U - \theta_i]$, при стартовой функции $\theta_0 = \gamma'_U$. Преобразование (368) может быть вычислено аналитически при помощи полученных в [33], соотношений. В этой работе показано, что, если $x_{n+1} = 1/[U - x_n]$, то справедливы следующие формулы:

$$x_n = \frac{1 + \varkappa^n y_0}{1/\xi + \xi \varkappa^n y_0} \quad \text{где } y_0 = \frac{1 - x_0/\xi}{\xi x_0 - 1} \quad (380)$$

и

$$\xi = \frac{1}{2} [U + \sqrt{U^2 - 4}], \quad \frac{1}{\xi} = \frac{1}{2} [U - \sqrt{U^2 - 4}] = \gamma_U, \quad \varkappa = \xi^2 = \frac{U + \sqrt{U^2 - 4}}{U - \sqrt{U^2 - 4}}. \quad (381)$$

В нашем случае стартовое значение $x_0 = \gamma'_U = 1/[U - \gamma_U - \varepsilon]$ и с помощью приведенных формул (380) и (381) можно получить, что

$$\theta_n(U) = \frac{1}{\xi} \frac{\varkappa^n [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon}{\varkappa^n [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon/\xi^2} = \xi \frac{\varkappa^n [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon}{\varkappa^{n+1} [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon} \quad (382)$$

после чего величины u_i и b_i при $i > 0$ несложно вычислять с помощью компьютера, причем оказывается, что вклад членов с $i = 1, 2, 3, \dots$ очень мал по сравнению со вкладом члена с $i = 0$. Поэтому формулы (294) и (295) (в которых приведен только член $i = 0$), являются, фактически, исчерпывающими.

Кратко изложим схему вычисления величин u_n и b_n при $n > 1$. Выражение (382) для $\theta_n(U)$ можно записать в виде частного:

$$\theta_n(U) = \frac{\mathcal{N}(U)}{\mathcal{D}(U)} \quad \text{где } \mathcal{N}(U) = \xi \varkappa^n [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon \xi, \quad (383)$$

$$\mathcal{D}(U) = \varkappa^{n+1} [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon] + \varepsilon \xi$$

Тогда величина u_n является корнем знаменателя, т.е. находится из уравнения:

$$\mathcal{D}(U) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varkappa^{n+1}(U) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon} \quad (384)$$

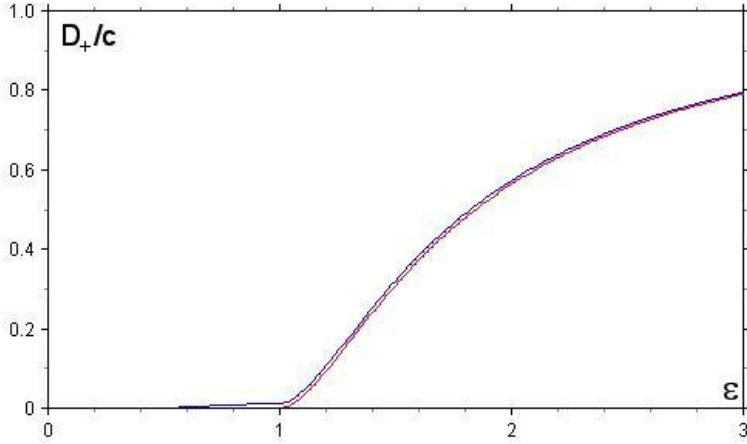


Рис. 23: Зависимость нормированного на концентрацию дефектов c вклада D_+ в критерий Андерсона от энергии дефекта ε с учетом и без учета вкладов выше нулевого порядка. Учет членов порядка выше нулевого приводит к незначительному изменению (возрастанию) этой зависимости.

При $n = 0$ это уравнение решается явно и результат представляет собой (378). В остальных случаях решение производится численно на компьютере, причем корень (если он есть)³⁰ находится в интервале $[2, \sqrt{4 + \varepsilon^2}]$. После того как корень u_n найден, амплитуда полюса b_n находится как:

$$b_n = \frac{\mathcal{N}(U)}{\mathcal{D}'(U)} \Big|_{U=u_n} \quad (385)$$

где производная знаменателя вычисляется по формуле

$$\mathcal{D}'(U) = \varkappa^n \left[\varkappa \frac{U}{\sqrt{U^2 - 4}} + [\sqrt{U^2 - 4} - \varepsilon](n + 1)\varkappa'(U) \right] \quad (386)$$

$$\varkappa'(U) = \frac{8}{\sqrt{U^2 - 4} [U - \sqrt{U^2 - 4}]^2}$$

Описанные выше расчеты были проделаны (Рис.23), причем оказалось, что вклад членов ряда (379) с $n > 0$ составляет $\sim 5\%$ от функции $W(U)$, рассчитанной с помощью соотношения (295). Поэтому при сличении с компьютерным экспериментом оказывалось достаточным брать функцию $W(U)$ в виде простой формулы (295).

³⁰Корень в требуемом интервале $|U| > 2$ есть не всегда. Как уже было показано, при $n = 0$ он появляется только при $\varepsilon > 1$. При $n > 0$ корень также появляется при некотором пороговом значении ε , которое зависит от n .

0.5.7 Приложение 2

Собственные функции и собственные значения оператора $H_U f(x) \equiv f(U - 1/x)/x^2$

В этом приложении мы приведем результаты относящиеся к системе специальных функций (322) оператора (321), использованных в этой главе при решении функциональных уравнений для совместной функции распределения опережающей и запаздывающей функций Грина. Несмотря на то, что материал данного Приложения имеет скорее математический характер, поместить его здесь представляется целесообразным для связности повествования. Кроме того, система функций, о которой пойдет речь, по сведениям автора, неизвестна в математике и, возможно, представляет самостоятельный интерес. Здесь уместно сказать, что случаи, когда удается точно найти собственные функции и собственные значения какого-либо не совсем тривиального оператора (например, полиномы Эрмита[108], полиномы Лежандра[109] и т.д.) не столь часты и область применения таких результатов иногда значительно выходит за рамки той первоначальной задачи, для которой они были получены.

Рассмотрим линейный оператор H_U , зависящий от параметра U и действующий на произвольную функцию $f(x)$ от вещественного x следующим образом

$$H_U f(x) \equiv \frac{1}{x^2} f\left(U - \frac{1}{x}\right) \quad (387)$$

и поставим вопрос о собственных значениях и собственных функциях такого оператора, т.е. попытаемся найти такие числа λ_U и функции $\sigma_U^\lambda(x)$ что:

$$H_U \sigma_U^\lambda(x) = \lambda_U \sigma_U^\lambda(x) \quad (388)$$

Будем искать *ограниченные* собственные функции (387). Зависимость собственных чисел и функций от параметра оператора U мы показываем нижним индексом, который иногда будем для краткости опускать. Мы будем считать, что $|U| < 2$, что соответствует области странного аттрактора отображения $x \rightarrow U - 1/x$, совпадающего с оператором H_U , с точностью до множителя $1/x^2$, который обеспечивает равенство интегралов $\int f(x)dx = \int H_U f(x)dx$.

Пользуясь (388) и (387) можно написать (не пишем индексы U и λ) что:

$$\begin{aligned}\sigma(x) &= \frac{1}{\lambda} \frac{1}{x^2} \sigma(U - 1/x) = \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{1}{x(U - 1/x)} \right)^2 \sigma(U - 1/U - 1/x) = \\ &= \frac{1}{\lambda^3} \left(\frac{1}{x(U - 1/x)(U - 1/U - 1/x)} \right)^2 \sigma(U - 1/U - 1/U - 1/x) = \\ &= \frac{1}{\lambda^n} \left(\overbrace{\frac{1}{x(U - 1/x)(U - 1/U - 1/x) \dots}}^n \right)^2 \sigma(\overbrace{U - 1/U - 1/U - 1/\dots 1/x}^n)\end{aligned}\quad (389)$$

Определим операцию T :

$$Tf(x) \equiv f(U - 1/x) \quad (390)$$

Тогда (389) можно переписать так:

$$\sigma(x) = \frac{1}{\lambda^n} \left[\prod_{k=0}^{n-1} T^k x \right]^{-2} \sigma(T^n x) \quad (391)$$

Теперь используем тот факт, что собственную функцию оператора H_U , соответствующую собственному числу $\lambda = 1$, можно угадать, это лорентцовская функция:

$$\mathcal{L}_U(x) = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\pi} \frac{1}{x^2 - Ux + 1} \quad (392)$$

Мы нормировали эту функцию так, что $\int \mathcal{L}_U(x) dx = 1$ Принимая это во внимание и используя (389), можно выразить входящее в (389) произведение многоэтажных дробей следующим образом:

$$\left[\prod_{k=0}^{n-1} T^k x \right]^{-2} = \frac{\mathcal{L}_U(x)}{\mathcal{L}_U(T^n x)} \quad (393)$$

и, следовательно:

$$\frac{\sigma(x)}{\sigma(T^n x)} = \frac{1}{\lambda^n} \frac{\mathcal{L}_U(x)}{\mathcal{L}_U(T^n x)} \quad (394)$$

Эта формула справедлива для любой собственной функции (387) и любого целого n . Так как мы ищем ограниченные собственные функции оператора (387), то, в силу ограниченности лорентцовских функций и необращения их в нуль при вещественном аргументе, должно быть $|\lambda| = 1$. В противном случае при $n \rightarrow \infty$ правая часть (394) будет либо неограниченно убывать, либо, наоборот, возрастать, что противоречит требованию ограниченности собственных функций $\sigma(x)$. Таким образом

$$\lambda = \exp(i\phi), \quad (395)$$

причем ϕ – вещественное число. Принимая это во внимание и беря модуль обеих частей (394), приходим к выводу, что:

$$|\sigma(x)| = \mathcal{L}_U(x) \quad (396)$$

и, следовательно:

$$\sigma(x) = \mathcal{L}_U(x) \exp(i\theta(x)) \quad (397)$$

причем функция $\theta(x)$ вещественна. Принимая во внимание (394) и (395), можно получить для функции $\theta(x)$ следующее функциональное уравнение:

$$\exp i[n\phi - \theta(T^n x) + \theta(x)] = 1 \quad (398)$$

откуда

$$n\phi - \theta(T^n x) + \theta(x) = 2\pi Mi_n(x) \quad (399)$$

где $Mi_n(x)$ – произвольная функция, принимающая целочисленные значения.

Допустим мы нашли функцию $\theta(x)$ такую что:

$$\theta(Tx) - \theta(x) = \theta(U - 1/x) - \theta(x) = \phi + 2\pi M(x) \quad (400)$$

где $M(x)$ – целочисленная функция x . Тогда:

$$\theta(T^{k+1}x) - \theta(T^k x) = \phi + 2\pi M(T^k x) \quad (401)$$

и, суммируя (401) по k от нуля до $n - 1$, получим:

$$\theta(T^n x) - \theta(x) = n\phi + 2\pi \sum_{k=0}^{n-1} M(T^k x) \quad (402)$$

Здесь мы считаем, что $T^0 x = x$. Следовательно, определенная из (400) функция $\theta(x)$ удовлетворяет (399), причем

$$Mi_n(x) = - \sum_{k=0}^{n-1} M(T^k x)$$

Таким образом, задача сводится к решению функционального уравнения (400). Как мы увидим ниже, это решение находится только при некотором определенном значении угла ϕ .

Для получения решения (400) рассмотрим вспомогательное функциональное уравнение

$$\frac{G(U - 1/x)}{G(x)} = \xi \quad (403)$$

Основанием к рассмотрению этого уравнения служит тот факт, что для функции $\ln G(x)$ получается уравнение сходное с (400). Ищем решение (403) в виде дробно-линейной функции:

$$G(x) = \frac{1 + ax}{1 + bx} \quad (404)$$

Подстановка (404) в (403) дает систему уравнений на a , b и ξ , решая которую, получаем что:

$$\xi = \frac{U^2 - 2 \pm i|U|\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad (405)$$

$$a = -\frac{1 + \xi}{U} \quad (406)$$

$$b = -\frac{1 + 1/\xi}{U} \quad (407)$$

Если $|U| < 2$ (т.е. мы имеем дело с отображением (390) в области странного аттрактора) то $|\xi| = 1$ ³¹ и, следовательно, ξ может быть представлено в виде:

$$\xi = \exp i\gamma \quad (408)$$

причем

$$\gamma = \arctg\left(\frac{|U|\sqrt{4 - U^2}}{U^2 - 2}\right) + \begin{cases} 0 & \text{при } \sqrt{2} < |U| < 2 \\ \pi & \text{при } \sqrt{2} > |U| \end{cases} \quad (409)$$

Наличие добавок в фигурных скобках навязывается непрерывностью зависимости ξ от U (405). Тогда нетрудно видеть, что $|G(x)| = 1$ и, следовательно:

$$G(x) = \exp i\alpha \quad (410)$$

причем

$$\operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} = \frac{x \sin \gamma}{x(1 + \cos \gamma) - U} \quad (411)$$

и, следовательно:

$$\alpha = 2 \arctg\left[\frac{x \sin \gamma}{x(1 + \cos \gamma) - U}\right] + 2\pi M(x) \quad (412)$$

где $M(x)$ какая-либо целочисленная функция x . Теперь нетрудно убедиться в том, что

$$\operatorname{Im} \ln G(x) = \alpha(x) \quad (413)$$

³¹ Оказывается, что знак в (405) не играет роли – его можно взять и фиксировать любым.

удовлетворяет уравнению (400) причем $\phi = \gamma$. Таким образом, окончательно решение уравнения (400) можно записать так:

$$\theta(x) = 2 \operatorname{arctg} \left[\frac{x \sin \phi}{x(1 + \cos \phi) - U} \right] \quad (414)$$

$$\phi = \operatorname{arctg} \left(\frac{|U| \sqrt{4 - U^2}}{U^2 - 2} \right) + \begin{cases} 0 & \text{при } \sqrt{2} < |U| < 2 \\ \pi & \text{при } \sqrt{2} > |U| \end{cases} \quad (415)$$

и

$$\theta(U - 1/x) - \theta(x) = \phi + 2\pi M(x) \quad (416)$$

Далее понятно, что функция $\theta_n(x) \equiv n \theta(x)$ где n – целое, удовлетворяет уравнению (400) причем $\phi \rightarrow \phi_n = n\phi$.

Таким образом, окончательно мы находим следующую систему собственных функций $\sigma_U^n(x)$ и собственных значений λ_n оператора (387):

$$\sigma_U^n(x) = \mathcal{L}_U(x) \exp in\theta(x), \quad \lambda_n = \exp in\phi \quad (417)$$

где n – произвольное целое число, а $\mathcal{L}_U(x)$, $\theta(x)$ и ϕ определяются соответственно (392), (414) и (415). Несложно убедиться том, что собственные числа (417) могут быть представлены в виде (322). Функции (417) удобно представить в дробно-рациональном виде, что будет сделано в следующем разделе этого Приложения.

Свойства функций (417) и разложение по ним

У собственных функций (417) должно быть следующее свойство: любая из них имеет нулевой интеграл, кроме той, которая соответствует единичному собственному числу (это лорентцовская функция $\mathcal{L}_U(x)$ (392)). Покажем это. Проинтегрируем уравнение для произвольной собственной функции

$$\frac{1}{x^2} \sigma(U - 1/x) = \lambda \sigma(x) \quad (418)$$

по x . Делая в левой части замену $1/x \rightarrow x$ получим, что

$$(1 - \lambda) \int \sigma(x) dx = 0 \quad (419)$$

Таким образом, если $\lambda \neq 1$, то

$$\int \sigma^{\lambda \neq 1}(x) dx = 0 \quad (420)$$

Второе свойство функций (417), важное для дальнейшего, вытекает непосредственно из соотношений (417):

$$\sigma_U^n(x) \exp im\theta_U(x) = \sigma_U^{n+m}(x) \quad (421)$$

Эти свойства дают возможность определять коэффициенты разложения по функциям (417). Действительно, допустим, что какая-либо функция $f(x)$ может быть разложена в ряд по функциям (417):

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \sigma_U^n(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \mathcal{L}_U(x) \exp[in\theta_U(x)] \quad (422)$$

Умножая обе части на $\exp -im\theta_U(x)$ и интегрируя, получим для коэффициентов разложения C_m следующее выражение:

$$C_m = \frac{\int f(x) \exp[-im\theta_U(x)] dx}{\int \mathcal{L}_U(x) dx} = \int f(x) \exp[-im\theta_U(x)] dx \quad (423)$$

Здесь мы учли нормировку функции $\mathcal{L}_U(x)$ (392). Функция $\theta_U(x)$ имеет разрыв в точке

$$x_0 = \frac{U}{1 + \cos \phi}$$

Ее можно превратить в непрерывную добавив подходящую функцию вида $2\pi M(x)$ ($M(x)$ – целочисленная функция). Так определенная функция $\theta_U(x)$ будет такой:

$$\theta_U(x) = 2 \operatorname{arctg} \left[\frac{x \sin \phi}{x(1 + \cos \phi) - U} \right] + \begin{cases} 0 & \text{при } x < x_0 \\ -2\pi|U|/U & \text{при } x > x_0 \end{cases} \quad (424)$$

Возможность разложения (423), (0.5.7) с функциями (424) проверялась прямым компьютерным счетом для разных функций $f(x)$.

Прямое алгебраическое преобразование в формуле (417) показывает, что функции $\sigma_U^n(x)$ можно представить в дробно-рациональном виде следующим образом:

$$\sigma_U^n(x) = \mathcal{L}_U(x) \left(\frac{x(|U| + i\sqrt{4 - U^2}) - 2U/|U|}{x(|U| - i\sqrt{4 - U^2}) - 2U/|U|} \right)^n \quad (425)$$

$$\mathcal{L}_U(x) = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\pi} \frac{1}{x^2 - Ux + 1}$$

$$\exp[i\theta_U(x)] = \frac{x(|U| + i\sqrt{4 - U^2}) - 2U/|U|}{x(|U| - i\sqrt{4 - U^2}) - 2U/|U|}$$

Из этого вытекает, что функции $\sigma_U^n(x)$ допускают следующую свободу в способах определения: при $n = 0$ это всегда лоренциан, а при $n \neq 0$ соответствующую собственную функцию можно домножать на произвольный коэффициент, но так чтобы сохранялись свойства (418 – 422)). Это переопределение можно сделать так, что рассматриваемые собственные функции (387) будут иметь такой вид:

$$\sigma_U^n(x) = \frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{x - R_U} - \frac{1}{x - R_U^*} \right) \left(\frac{x - R_U^*}{x - R_U} \right)^n \quad (426)$$

$$R_U \equiv \frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad (427)$$

$$R_U^* \equiv \frac{U - i\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad (428)$$

$$R_U^* R_U = 1 \quad (429)$$

а разложение произвольной функции $f(x)$ по функциям (426) будет таким:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \sigma_U^n(x) \quad (430)$$

где

$$C_n = \int f(x) \left(\frac{x - R_U}{x - R_U^*} \right)^n dx \quad (431)$$

0.6 СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЕ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЕЙ

0.6.1 Постановка задачи и основные результаты

Эта глава диссертационной работы посвящена развитию и обобщению изложенного в предыдущей главе подхода к анализу динамики возбуждения в одномерной разупорядоченной цепочке, основанному на исследовании совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. Этот подход оказывается эффективным во всех случаях, когда при увеличении длины цепочки на одну структурную единицу есть возможность выразить краевую функцию Грина (КФГ) увеличенной цепочки через КФГ исходной цепочки. В данной главе работы мы описываем такую модель, представляющую собой обобщение модели, рассмотренной в заключительных разделах предыдущей главы. Поскольку, как будет показано ниже, спектральное поведение степени локализации состояний в этой модели *качественно* отличается от рассмотренного в предыдущей главе, представляется уместным поместить здесь ряд общих замечаний, касающихся роли одномерных разупорядоченных моделей в теории твердого тела.

Традиционно одномерные модели исследовались в теории твердого тела для получения сведений качественного характера, которые затем использовались для анализа более реалистичных трехмерных моделей. Например, точнорешаемая одномерная модель Кронига-Пени [34, 4, 5], демонстрируя важнейшие *качественные* свойства трансляционно симметричных систем – зонный характер энергетического спектра и возможность классификации состояний по волновому вектору – создала основу современной теории кристаллических материалов. Вторым (и далеко не последним) примером может служить модель Изинга [35, 102, 103, 104] в теории фазовых переходов, когда точный анализ одномерной модели показал решающую роль собственно размерности системы для наблюдения в ней критического поведения. Приведенные примеры, относящиеся ко времени, когда физи-

ка твердого тела находилась в стадии накопления информации, показывают, что анализ даже отвлеченных (т.е. не соответствующих какой-либо реальной физической системе) одномерных моделей может давать важную качественную информацию.

Отметим, что в настоящее время есть основания полагать, что значение одномерных моделей этим не ограничивается. Современные технологии производства материалов и методики эксперимента позволяют создавать и изучать объекты (квантовые сверхрешетки, квантовые проволоки, J -агрегаты, оптические волноводные волокна и др.), которые, возможно, могут быть количественно описаны такими моделями. Тем не менее, эвристическое значение одномерных моделей является, по-видимому, на сегодняшний день основным.

Особенно важное место одномерные модели занимают в ряду моделей физики разупорядоченных систем, которые являются предметом исследования данной диссертационной работы. Поскольку, как уже было отмечено, этот раздел физики твердого тела в настоящее время находится (по мнению автора) в стадии накопления информации, последовательный математический анализ даже отвлеченной модели, дающий надежные и нетривиальные результаты (особенно качественного характера!), представляет интерес. Примерами подобного анализа могут служить работы [36, 37, 38, 39, 40], посвященные локализации состояний в одномерных случайных системах и близкие по тематике к материалу данной главы диссертации.

Приведенный в предыдущей главе анализ одномерной локализации относится к классическому случаю разупорядоченной цепочки с простейшей структурной единицей – двухуровневой системой. В данной главе диссертационной работы производится, во-первых, обобщение описанного в предыдущей главе метода на случай разупорядоченной цепочки с более сложной структурной единицей – фрагментом, состоящим из m связанных двухуровневых систем – и, во-вторых, расчет спектральной зависимости степени локализации состояний в такой системе. Основным количественным результатом, приводимым в этой главе диссертации, является вывод аналитической формулы для упомянутой степени локализации. Полученная формула показывает, что распределение степени локализации по энергетическому спектру для модели с $m > 1$ существенно неоднородно и характеризуется появлением $m - 1$ -ой энергетической точки, где состояния *практически делокализованы*. Этот результат дает основание сделать следующее качественное заключение: *в одномер-*

ных системах со сложной структурной единицей спектральное распределение степени локализации может быть существенно неоднородным и характеризоваться рядом резко выраженных максимумов и минимумов. Такое поведение степени локализации находится в качественном отличии от такового для случая $m = 1$, который был рассмотрен в предыдущей главе. Заметим, что, на наш взгляд, рассматриваемая ниже модель разупорядоченной цепочки со сложной структурной единицей во всяком случае не является более отвлеченной, чем классическая модель с $m = 1$, а в качественном отношении, возможно, даже более близка к реальным системам, чем классическая модель.

Перейдем к количественной постановке задачи. Рассмотрим одномерную цепочку двухуровневых атомов, состоящую из фрагментов длины m , причем расщепление всех атомов, принадлежащих одному фрагменту, одинаково, а неупорядоченность модели заключается в том, что от фрагмента к фрагменту расщепление может меняться случайным образом. Расщепления, соответствующие различным фрагментам, мы будем считать независимыми случайными величинами с известной функцией распределения $P(\varepsilon)$. Такая система отличается от стандартной [19, 41] только тем, что в качестве структурной единицы выступает не одна двухуровневая система, а фрагмент из m связанных двухуровневых систем. Таким образом, матрица \mathbf{H} гамильтониана исследуемой модели будет иметь обычный вид

$$H_{r,r'} = \delta_{r,r'}\varepsilon_r + \delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}, \quad r, r' = 1, \dots, N \quad (432)$$

где распределение диагональных элементов ε_r соответствует описанным выше фрагментам. Если, например, $m = 2$, то $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \neq \varepsilon_3 = \varepsilon_4 \neq \varepsilon_5 = \varepsilon_6 \neq \dots$ и элементы $\varepsilon_1, \varepsilon_3, \varepsilon_5, \dots$ являются независимыми случайными величинами с функцией распределения $P(\varepsilon)$. Равные единице недиагональные элементы (432) определяют масштаб энергии. Всюду ниже мы, как обычно, будем подразумевать термодинамический предел $N \rightarrow \infty$.

Для такой модели рассмотрим задачу, аналогичную рассмотренной в предыдущей главе диссертации. Воспроизведем здесь для связности повествования ее конкретную постановку. Пусть при $t = 0$ крайний атом ($r = N$) был возбужден и требуется найти вероятность D того, что этот атом останется в возбужденном состоянии при $t \rightarrow \infty$. С формальной точки зрения это означает, что начальное состояние системы описывается волновой функцией (вектором-столбцом) $\Psi(0)$ с компонентами $\Psi_r(0) = \delta_{r,N}$, и требуется найти $D = \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle$, причем угловые скобки обозначают усреднение по реализа-

циям случайных расщеплений $\varepsilon_r, r = 1, \dots, N$. Зависимость волновой функции системы от времени определяется следующим образом: $\Psi(t) = \exp(i\mathbf{H}t)\Psi(0)$. Отсюда следует, что интересующая нас величина D может быть выражена через собственные векторы Ψ^λ и собственные числа $E_\lambda, \lambda = 1, \dots, N$ матрицы (432) следующим образом:

$$D = \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \sum_{\lambda\lambda'} |\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 \exp i(E_\lambda - E_{\lambda'})t \right\rangle = \left\langle \sum_\lambda |\Psi_N^\lambda|^4 \right\rangle \quad (433)$$

Как было сказано в предыдущей главе работы,[41, 31, 19] величина D является ключевой в теории андерсоновской локализации, согласно которой *отличие величины D от нуля свидетельствует о том, что среди собственных функций гамильтониана (432) есть локализованные в смысле критерия Андерсона.*

Для количественного описания степени локализации собственных векторов (432) в спектральном интервале $[U, U + dU]$, введем, как и выше, функцию "участия"(293) $W(U)$, определяющуюся соотношением:

$$W(U)dU = \left\langle \sum_{E_\lambda \in [U, U+dU]} |\Psi_N^\lambda|^4 \right\rangle, \quad (434)$$

Очевидно, $D = \int W(U)dU$. Выше было показано, что, если все состояния в интервале $[U, U + dU]$ делокализованы, то $W(U) = 0$. В противном случае $W(U)$ отлична от нуля. Нетрудно проверить, что функции $W(U)$ можно придать также смысл среднего квадрата модуля частотного спектра колебаний волновой функции на крайнем узле.³² При наличие локализации эти колебания не затухают, чему и соответствует отличие $W(U)$ от нуля.

Основным результатом данной главы диссертации являются следующие формулы для функции участия $W(U)$ и величины D , применимые к одномерной случайной цепочке с описанной выше сложной структурной единицей:

$$W(U) = \frac{\Theta(2 - |U|) \Delta^2 M_2}{\pi m \sqrt{4 - U^2}} \sin^2 \left[m \arctg \left(\frac{\sqrt{4 - U^2}}{U} \right) \right] + O(\Delta^3), \quad D = \frac{\Delta^2 M_2}{2m} + O(\Delta^3) \quad (435)$$

Здесь величина Δ является параметром функции распределения узельных энергий $P(\varepsilon)$, которую ниже мы будем брать в виде (348). Напомним, что Δ является мерой разупорядоченности модели и случай $\Delta = 0$ соответствует отсутствию беспорядка.

³²В колебательных задачах, в которых динамическая матрица имеет вид близкий к (432), функция $W(U)$ связана с квадратом модуля частотного спектра колебаний крайнего осциллятора. Эта функция представляет собой Фурье-образ автокорреляционной функции смещения крайнего узла.

Из формулы (435) следует, что при энергиях $U = \mathcal{E}_n$, определяемых условиями

$$\operatorname{arctg}\left(\frac{\sqrt{4 - \mathcal{E}_n^2}}{\mathcal{E}_n}\right) = \frac{\pi n}{m}, \quad \mathcal{E}_n = \pm \frac{2}{\sqrt{\operatorname{tg}^2\left[\frac{\pi n}{m}\right] + 1}}, \quad |\mathcal{E}_n| < 2, \quad n - \text{целое}, \quad (436)$$

функция участия $W(\mathcal{E}_n)$ обращается в нуль с точностью до членов порядка Δ^3 , т.е. состояния в этих энергетических точках оказываются в рассматриваемом приближении делокализованными. Этот результат представляется странным, поскольку считается доказанным[19], что в одномерной однородной случайной системе все состояния локализованы. В связи с этим нами был предпринят анализ следующего члена разложения функции $W(U)$ по степеням Δ , который показал, что этот член расходится при $U = \mathcal{E}_n$ (436). Такое "противофазное" поведение вкладов различного порядка должно приводить к тому, что при небольшой степени разупорядоченности (т.е. при малых Δ) формула (435) должна хорошо работать при любых значениях энергии, кроме малых областей вблизи значений \mathcal{E}_n . В этих точках (где поправка $\sim \Delta^2$ (435) обращается в нуль) должны наблюдаться узкие максимумы функции участия $W(U)$, соответствующие расходимости следующей поправки. Описанный в заключительной части этой главы диссертации численный эксперимент полностью подтверждает сказанное.

0.6.2 Статистика функций Грина

В этом разделе мы приведем анализ совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, во многом сходный с приведенным в предыдущей главе, однако, имеющий большую степень общности и ориентированный на решение рассматриваемой в данной главе диссертации задачи о динамике одномерной цепочки со сложной структурной единицей. Напомним, что средний квадрат модуля волновой функции на краевом узле $\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle$ (с которым интересующая нас величина (433) связана как $D = \langle |\Psi_N(\infty)|^2 \rangle$) может быть вычислен при помощи формулы (297):

$$\langle |\Psi_N(t)|^2 \rangle = \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi^2} \int dU_1 dU_2 \exp[i(U_1 - U_2)t] \langle \gamma(U_1 - iV_1) \gamma(U_2 + iV_2) \rangle, \quad (437)$$

где $\gamma(\Omega)$ – краевая функция Грина (КФГ) для гамильтониана (432):

$$\gamma(\Omega) \equiv \sum_{\lambda} \frac{|\Psi_N^{\lambda}|^2}{\Omega - E_{\lambda}} \quad (438)$$

Как уже было отмечено в предыдущей главе работы, для вычисления входящего в (437) среднего значения произведения двух функций Грина при различных комплексных энергиях $\Omega_1 = U_1 - \imath V_1$ и $\Omega_2 = U_2 + \imath V_2$ необходимо знать их совместную функцию распределения (статистику) $\rho(\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2)$ ($\rho(\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2)d\alpha_1d\beta_1d\alpha_2d\beta_2$ равна вероятности того, что $\text{Re } \gamma(\Omega_i) \in [\alpha_i, \alpha_i + d\alpha_i]$ и $\text{Im } \gamma(\Omega_i) \in [\beta_i, \beta_i + d\beta_i]$, $i = 1, 2$). Функцию ρ мы будем иногда записывать как функцию (вещественную) двух комплексных переменных $z_i = \alpha_i + \imath\beta_i$, $i = 1, 2$: $\rho(\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2) = \rho(z_1z_2)$. Следуя методике, изложенной в предыдущей главе [24, 41], получим уравнение для этой функции.

Рассмотрим описанную во вводной части этой главы диссертации цепочку, структурной единицей которой является фрагмент, состоящий из m двухуровневых систем. Пусть N есть номер крайней двухуровневой системы в крайнем фрагменте, а γ_N – КФГ такой цепочки. Если теперь к этой цепочке добавить еще один фрагмент из m узлов с расщеплением ε , то КФГ $\tilde{\gamma}$, соответствующая крайнему узлу этой новой цепочки, может быть выражена через γ

$$\tilde{\gamma}(\Omega) = \mathcal{R}_{\Omega-\varepsilon}^{-1}(\gamma), \quad (439)$$

причем явный вид функции $\mathcal{R}_{\Omega-\varepsilon}^{-1}(\gamma)$ для произвольного m мы приведем несколько ниже, а пока напомним, что для рассмотренного в предыдущей главе случая $m = 1$: $\mathcal{R}_{\Omega-\varepsilon}^{-1}(\gamma)|_{m=1} = 1/[\Omega - \varepsilon - \gamma]$ (формула (299)). Соотношение (439) позволяет выразить статистику краевых функций Грина цепочки с добавленным фрагментом (обозначим ее $\tilde{\rho}(x_1, y_1, x_2, y_2)$) через функцию $\rho(\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2)$ исходной цепочки следующим образом:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(x_1y_1x_2y_2) = & \int d\varepsilon d\alpha_1d\beta_1d\alpha_2d\beta_2 P(\varepsilon) \rho(\alpha_1\beta_1\alpha_2\beta_2) \times \\ & \times \delta\left[x_1 - \text{Re } \mathcal{R}_{\Omega_1-\varepsilon}^{-1}(\alpha_1 + \imath\beta_1)\right] \delta\left[y_1 - \text{Im } \mathcal{R}_{\Omega_1-\varepsilon}^{-1}(\alpha_1 + \imath\beta_1)\right] \times \\ & \times \delta\left[x_2 - \text{Re } \mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}^{-1}(\alpha_2 + \imath\beta_2)\right] \delta\left[y_2 - \text{Im } \mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}^{-1}(\alpha_2 + \imath\beta_2)\right] \end{aligned} \quad (440)$$

Условие стационарности статистики в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$ дает $\tilde{\rho} = \rho$ и, вычисляя интегралы с δ -функциями в (440), можно получить следующее уравнение для стационарной совместной функции распределения КФГ:

$$\rho(\gamma_1, \gamma_2) = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \left| \frac{d\mathcal{R}_{\Omega_1-\varepsilon}(\gamma_1)}{d\gamma_1} \right|^2 \left| \frac{d\mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}(\gamma_2)}{d\gamma_2} \right|^2 \rho\left(\mathcal{R}_{\Omega_1-\varepsilon}(\gamma_1), \mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}(\gamma_2)\right) \quad (441)$$

В этом уравнение мы обозначили символом \mathcal{R} преобразование обратное (439) и записали совместную статистику ρ как функцию двух комплексных аргументов, а не четырех вещественных, как в (440).

Тот факт, что в формуле (437) фигурируют функции Грина с предельно малыми мнимыми частями энергетических аргументов можно использовать для сведения задачи к анализу уравнения существенно более простого, чем (441). Опираясь на опыт, накопленный в предыдущей главе работы, запишем входящее в (437) усредненное произведение двух функций Грина в виде следующей суммы четырех средних:

$$\begin{aligned} \langle \gamma(U_1 - \imath V_1) \gamma(U_2 + \imath V_2) \rangle &= \int dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 \rho(x_1 y_1 x_2 y_2) [x_1 x_2 - y_1 y_2 + \imath(x_1 y_2 + x_2 y_1)] \equiv (442) \\ &\equiv \langle x_1 x_2 \rangle - \langle y_1 y_2 \rangle + \imath \langle x_1 y_2 \rangle + \imath \langle y_1 x_2 \rangle, \end{aligned}$$

причем, как было показано выше (см. замечания после формулы (305)), достаточно вычислить лишь вклад, связанный с $\langle x_1 y_2 \rangle$ и учетверить результат. Используя уравнение (441), можно записать интересующую нас величину $\langle x_1 y_2 \rangle$ в виде

$$\begin{aligned} \langle x_1 y_2 \rangle &= \int \rho(x_1 y_1 x_2 y_2) x_1 y_2 dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \left| \frac{d\mathcal{R}_{\Omega_1 - \varepsilon}(\gamma_1)}{d\gamma_1} \right|^2 \left| \frac{d\mathcal{R}_{\Omega_2 - \varepsilon}(\gamma_2)}{d\gamma_2} \right|^2 \times (443) \\ &\times \rho\left(u_{\Omega_1 - \varepsilon}(x_1 y_1), v_{\Omega_1 - \varepsilon}(x_1 y_1), u_{\Omega_2 - \varepsilon}(x_2 y_2), v_{\Omega_2 - \varepsilon}(x_2 y_2)\right) x_1 y_2 dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 d\varepsilon \end{aligned}$$

где вещественные функции $u_\Omega(x, y)$ и $v_\Omega(x, y)$ и фигурирующие в (441) и (443) якобианы определяются соотношениями

$$u_\Omega(x, y) + w_\Omega(x, y) \equiv \mathcal{R}_\Omega(x + \imath y), \quad (444)$$

$$\left| \frac{d\mathcal{R}_{\Omega_i - \varepsilon}(\gamma_i)}{d\gamma_i} \right|^2 = \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial u_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial x_i} & \frac{\partial u_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial y_i} \\ \frac{\partial v_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial x_i} & \frac{\partial v_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial y_i} \end{array} \right| = \left(\frac{\partial u_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial x_i} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{\Omega_i - \varepsilon}}{\partial x_i} \right)^2, \quad \gamma_i = x_i + \imath y_i, \quad (445)$$

($i = 1, 2$) причем в формуле (445) использованы условия Коши-Римана.

Сделаем теперь в интеграле (443) замену переменных:

$$\tilde{x}_1 = u_{\Omega_1 - \varepsilon}(x_1 y_1), \quad \tilde{y}_1 = v_{\Omega_1 - \varepsilon}(x_1 y_1), \quad \tilde{x}_2 = u_{\Omega_2 - \varepsilon}(x_2 y_2), \quad \tilde{y}_2 = v_{\Omega_2 - \varepsilon}(x_2 y_2) \quad (446)$$

Поскольку якобианы этих преобразований совпадают с (445), то для $\langle x_1 y_2 \rangle$ получаем следующее выражение:

$$\langle x_1 y_2 \rangle = \int d\varepsilon d\tilde{x}_1 d\tilde{y}_1 d\tilde{x}_2 d\tilde{y}_2 P(\varepsilon) \rho(\tilde{x}_1 \tilde{y}_1 \tilde{x}_2 \tilde{y}_2) x_1(\tilde{x}_1 \tilde{y}_1) y_2(\tilde{x}_2 \tilde{y}_2), \quad (447)$$

причем вид преобразований $x_1(\tilde{x}_1\tilde{y}_1)$ и $y_2(\tilde{x}_2\tilde{y}_2)$ определяется функцией $\mathcal{R}_{\Omega-\varepsilon}^{-1}(\gamma)$ (439):

$$x_1 = \operatorname{Re} \left[\mathcal{R}_{\Omega_1-\varepsilon}^{-1}(\tilde{x}_1 + i\tilde{y}_1) \right], \quad y_2 = \operatorname{Im} \left[\mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}^{-1}(\tilde{x}_2 + i\tilde{y}_2) \right] \quad (448)$$

Как было показано в предыдущей главе диссертации, для вычисления $\langle x_1 y_2 \rangle$ при предельно малых мнимых частях энергетических аргументов (т.е. при $V_i \rightarrow +0$), в формулу (447) можно подставить вместо ρ ее предельное значение ρ_0 , соответствующее чисто вещественным энергиям $\Omega_i \rightarrow U_i$ ($i = 1, 2$), однако, в преобразованиях (448) необходимо учесть мнимые части энергетических аргументов V_i (пользуясь, разумеется, по мере возможности их малостью). Рассуждения, аналогичные приведенным в предыдущей главе работы (см. формулы (307,308) и текст рядом), показывают, что функция ρ_0 может быть представлена в виде

$$\rho_0(x_1 y_1 x_2 y_2) \equiv \rho(x_1 y_1 x_2 y_2) \Big|_{\Omega_{1,2}=U_{1,2}} = \sigma_{U_1 U_2}(x_1 x_2) \delta(y_1) \delta(y_2) \quad (449)$$

где функция $\sigma_{U_1 U_2}(x_1, x_2)$ определяет статистику *вещественных функций Грина* и удовлетворяет уравнению значительно более простому, чем (441):

$$\sigma_{U_1 U_2}(x_1 x_2) = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma_{U_1 U_2} \left[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right|, \quad (450)$$

Таким образом, в формулах (447) и (448) можно сразу положить $\tilde{y}_{1,2} = 0$, поскольку в выражение для ρ_0 (449) входят соответствующие дельта-функции. Следующий шаг заключается в том, что для входящей в формулу (448) величины x_1 можно написать предельное при $V_1 \rightarrow 0$ выражение

$$x_1 = \mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}^{-1}(\tilde{x}_1), \quad (451)$$

поскольку преобразования (439) для вещественных аргумента γ и энергии Ω дает вещественный результат.

Существенно иная ситуация имеет место для фигурирующей в (448) величины y_2 , которая, с учетом сделанных выше замечаний, имеет вид $y_2 = \operatorname{Im} \mathcal{R}_{U_2+iV_2-\varepsilon}^{-1}(\tilde{x}_2)$. В общем случае мнимая часть в этом выражение стремиться к нулю в силу отмеченной выше вещественности преобразования $\mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}^{-1}$ при $V_2 \rightarrow 0$. Исключениями являются особые точки преобразования $\mathcal{R}_{\Omega_2-\varepsilon}^{-1}$, т.е. такие значения его аргумента x_0 , при которых $\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}^{-1}(x_0) \rightarrow \infty$.

³³ На этом этапе вычислений нам уже необходим явный вид преобразования $\mathcal{R}_\Omega^{-1}(x)$ [33]:

$$\mathcal{R}_\Omega^{-1}(x) = \frac{\sin(m\varphi) - \sin[(m-1)\varphi]x}{\sin[(m+1)\varphi] - \sin(m\varphi)x} \equiv \frac{a_\Omega + b_\Omega x}{c_\Omega + g_\Omega x}, \quad (452)$$

где³⁴

$$\varphi = -\operatorname{arctg}\left[\frac{\sqrt{4 - \Omega^2}}{\Omega}\right] - \pi\Theta(-\Omega)$$

Особая точка $z_0 = -c_\Omega/g_\Omega \equiv \alpha_0 + i\beta_0$ функции $\mathcal{R}_\Omega^{-1}(z)$ соответствует нулю знаменателя (452) и в интересующем нас пределе $\operatorname{Im} \Omega \rightarrow 0$ ее мнимая часть стремится к нулю $\beta_0 \rightarrow 0$. Имея это ввиду и рассуждая так, как это было сделано в простом примере, приведенном в сноске, можно убедиться в том, что выражение (448) для y_2 может быть записано в виде

$$y_2 \Big|_{V_2 \rightarrow 0} = \lim_{V_2 \rightarrow 0} \operatorname{Im} \left[\mathcal{R}_{\Omega_2 - \varepsilon}^{-1}(\tilde{x}_2) \right] = \pi \frac{a_U g_U - b_U c_U}{g_U^2} \delta\left(\tilde{x}_2 + \frac{c_U}{g_U}\right), \quad U \equiv U_2 - \varepsilon \quad (453)$$

Из формул (451) и (452) следует следующее выражение для x_1 (448)

$$x_1 \Big|_{V_1 \rightarrow 0} = \frac{a_U + b_U x}{c_U + g_U x}, \quad U = U_1 - \varepsilon \quad (454)$$

Заменяя теперь в формуле (447) $\rho_{U_1 U_2}(x_1 y_1 x_2 y_2) \rightarrow \sigma_{U_1 U_2}(x_1 x_2) \delta(y_1) \delta(y_2)$, (формула (449)) и подставляя туда выражения (453) и (454) для y_2 и x_1 , получим

$$\langle x_1 y_2 \rangle = \pi \int d\varepsilon dx P(\varepsilon) \sigma_{U_1 U_2}\left(x, -\frac{c_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}}\right) \frac{a_{U_2 - \varepsilon} g_{U_2 - \varepsilon} - b_{U_2 - \varepsilon} c_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}^2} \frac{a_{U_1 - \varepsilon} + b_{U_1 - \varepsilon} x}{c_{U_1 - \varepsilon} + g_{U_1 - \varepsilon} x} \quad (455)$$

Для дальнейшего упрощения этой формулы введем новую переменную

$$z = \mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}^{-1}(x) = \frac{a_{U_1 - \varepsilon} + b_{U_1 - \varepsilon} x}{c_{U_1 - \varepsilon} + g_{U_1 - \varepsilon} x}. \quad \text{Тогда} \quad x = \mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z), \quad dx = \frac{d\mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z)}{dz} dz \quad (456)$$

и формула (455) может быть преобразована следующим образом

$$\langle x_1 y_2 \rangle = -\pi \int d\varepsilon dz z P(\varepsilon) \frac{d\mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z)}{dz} \sigma_{U_1 U_2}\left(\mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z), -\frac{c_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}}\right) \frac{a_{U_2 - \varepsilon} g_{U_2 - \varepsilon} - b_{U_2 - \varepsilon} c_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}^2} \quad (457)$$

³³ Это можно пояснить следующим примером. Пусть, например, $\mathcal{R}^{-1}(\gamma) = 1/[\Omega + \gamma]$, где в общем случае $\Omega = U + iV$ и $\gamma = x + iy$. При вещественных Ω и γ ($V = y = 0$) это преобразование вещественно и имеет особую точку $x_0 = -U$. Если $V \neq 0$, то у преобразования появляется мнимая часть, локализованная (при малом V) в этой особой точке: $\operatorname{Im} \mathcal{R}^{-1}(x) = -V/[(x+U)^2 + V^2] \rightarrow -\pi\delta(x+U)$. В нашем случае преобразование $\mathcal{R}_{\Omega - \varepsilon}^{-1}(\gamma)$ более сложное, но мнимая часть возникает так же как в этом простом примере.

³⁴ Член с Θ -функцией в нижеследующей формуле имеет смысл только когда величина Ω вещественна. Этот член обеспечивает непрерывность угла $\varphi(\Omega)$ при $|\Omega| < 2$.

Используем теперь уравнение (450), из которого следует, что

$$\lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \sigma_{U_1 U_2}(z, a) = \lim_{a \rightarrow \infty} \int d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma_{U_1 U_2} \left(\mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z), \mathcal{R}_{U_2 - \varepsilon}(a) \right) \frac{d\mathcal{R}_{U_1 - \varepsilon}(z)}{dz} \frac{d\mathcal{R}_{U_2 - \varepsilon}(a)}{da} a^2 \quad (458)$$

Из формулы (452) несложно получить, что

$$\mathcal{R}_U(z) = \frac{a_U - c_U z}{g_U z - b_U}, \quad \frac{d\mathcal{R}_U(z)}{dz} = \frac{b_U c_U - a_U g_U}{[g_U z - b_U]^2}, \quad (459)$$

и вычислить входящие в уравнение (458) пределы

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \mathcal{R}_{U_2 - \varepsilon}(a) = -\frac{c_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}}, \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{d\mathcal{R}_{U_2 - \varepsilon}(a)}{da} a^2 = \frac{b_{U_2 - \varepsilon} c_{U_2 - \varepsilon} - a_{U_2 - \varepsilon} g_{U_2 - \varepsilon}}{g_{U_2 - \varepsilon}^2} \quad (460)$$

Имея это ввиду и сравнивая (458) с (457), окончательно получаем, что

$$\langle x_1 y_2 \rangle = \pi \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int \sigma_{U_1 U_2}(x, a) x dx \quad (461)$$

0.6.3 Вычисление вклада $\langle x_1 y_2 \rangle$

Сделаем в формуле (437) замену переменных $\omega \equiv U_2 - U_1, U = U_1$. Тогда, с учетом замечания, приведенного после формулы (442) и полученного выше выражения (461), для интересующей нас величины D можно написать следующее выражение:

$$\begin{aligned} D &= \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle = \frac{i}{\pi^2} \lim_{V_{1,2} \rightarrow 0, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} \langle x_1 y_2 \rangle d\omega dU = \\ &= \frac{i}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} a^2 \sigma_{U, U+\omega}(x, a) x dx d\omega dU \end{aligned} \quad (462)$$

Причем, как было показано в предыдущей главе диссертации (см. замечание после формулы (306)), функция участия $W(U)$ может быть получена из выражения (462), если в нем опустить интегрирование по U :

$$W(U) = \frac{i}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} a^2 \sigma_{U, U+\omega}(x, a) x dx \quad (463)$$

Как и выше, представим функцию распределения энергий узлов $P(\varepsilon)$ в следующем виде

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\Delta} p\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right), \quad \text{где } p(x) > 0, \int p(x) dx = 1, \int p(x) x^n dx = M_n \text{ и } M_1 = 0. \quad (464)$$

В случае упорядоченной цепочки $\Delta \rightarrow 0$ и $D = W(U) = 0$. Развита в предыдущем разделе диссертации[41] теория возмущений для решения уравнения (308), аналогичного

(450), представляет собой разложение по степеням величины Δ , причем первая ненулевая поправка имеет порядок Δ^2 . В предыдущей главе работы также было показано, что для вычисления величин D и $W(U)$ необходима только сингулярная по $\omega = U_2 - U_1$ часть решения уравнения для совместной статистики функций Грина (в нашем случае уравнения (450)), причем сингулярность имеет вид полюса. Поэтому, если обозначить указанную сингулярную часть символом sing , то для нее можно написать следующее выражение

$$\text{sing } \sigma_{U\omega}(x_1x_2) = \frac{\Delta^2}{\omega} \mathcal{F}_U(x_1x_2) + O(\Delta^3) \quad (465)$$

Тогда с помощью формулы (461), для интересующей нас функции $W(U)$ получаем следующую формулу:

$$W(U) = -\Delta^2 \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int \mathcal{F}_U(x, a) x dx + O(\Delta^3) \quad (466)$$

В следующем разделе будет описана теория возмущений для решения уравнения (450) и получено явное выражение для функции $\mathcal{F}_U(x_1x_2)$.

0.6.4 Теория возмущений для уравнения (450)

Будем считать, что параметр Δ мал и представим искомую функцию $\sigma_{U_1U_2}(x_1x_2)$ в виде ряда по степеням Δ

$$\sigma_{U_1U_2}(x_1x_2) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x_1, x_2) \Delta^n \quad (467)$$

Разложим функцию $\sigma_{U_1U_2}[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right|$, стоящую под знаком интеграла в правой части (450), в ряд по степеням ε . Тогда уравнение (450) дает

$$\sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x_1, x_2) \Delta^n = \quad (468)$$

$$\sum_{n,l=0}^{\infty} \frac{M_n \Delta^{n+l}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varepsilon^n} \left\{ Q_l \left[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right| \right\}_{\varepsilon=0}$$

Приравнивая коэффициенты при равных степенях Δ в левой и правой частях (468), получаем рекуррентные соотношения для функций Q_n :

$$\Delta^0 : \quad Q_0(x_1x_2) - Q_0 \left[\mathcal{R}_{U_1}(x_1), \mathcal{R}_{U_2}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2}(x_2)}{dx_2} \right| = 0 \quad (469)$$

Равенство нулю первого момента функции $P(\varepsilon)$ приводит к тому, что $Q_1(x_1x_2) = 0$

$$\begin{aligned} \Delta^2 : \quad & Q_2(x_1x_2) - Q_2\left[\mathcal{R}_{U_1}(x_1), \mathcal{R}_{U_2}(x_2)\right] \left\| \frac{d\mathcal{R}_{U_1}(x_1)}{dx_1} \right\| \left\| \frac{d\mathcal{R}_{U_2}(x_2)}{dx_2} \right\| = \quad (470) \\ & = \frac{M_2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left\{ Q_0\left[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)\right] \left\| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right\| \left\| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right\| \right\}_{\varepsilon=0} \quad \text{и т.д.} \end{aligned}$$

Определим теперь линейный оператор \mathcal{H}^m , который действует на произвольную функцию $f(x)$ следующим образом

$$\mathcal{H}_U^m f(x) \equiv \frac{d\mathcal{R}_U}{dx} f[\mathcal{R}_U(x)] \quad (471)$$

Здесь $\mathcal{R}_U(x)$ – отображение обратное (452). В предыдущей главе диссертации (см. Приложение 2) для оператора $\mathcal{H}^1 f(x) = f(U - 1/x)/x^2$ ($m = 1$) была решена спектральная задача и показано, что при $|U| < 2$ его собственные функции $\sigma_U^n(x)$ и собственные числа λ_n определяются выражениями:

$$\sigma_U^n(x) = \mathcal{L}_U(x) \left[\frac{R_U^* - x}{R_U - x} \right]^n \equiv \mathcal{L}_U(x) G_U^n(x), \quad \lambda_n = \left(\frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{U - i\sqrt{4 - U^2}} \right)^n, \quad |\lambda_n| = 1 \quad (472)$$

где

$$G_U(x) = \frac{R_U^* - x}{R_U - x} \quad R_U = \frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad R_U^* = \frac{U - i\sqrt{4 - U^2}}{2},$$

а лорентциан $\mathcal{L}_U(x)$ определяется соотношением:

$$\mathcal{L}_U(x) = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\pi} \frac{1}{x^2 - Ux + 1} = \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - R_U} - \frac{1}{x - R_U^*} \right] \quad (473)$$

Напомним полученное выше (430, 431) правило проектирования на систему функций (472), которое заключается в том, что произвольная функция $f(x)$ может быть представлена в виде ряда:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \sigma_U^n(x), \quad \text{где } A_n = \int \frac{f(x)}{G_U^n(x)} dx \quad (474)$$

Прямая проверка показывает, что функции $\sigma_U^n(x)$ являются собственными также и для оператора \mathcal{H}^m (471), а собственные числа получаются как m -я степень чисел (472): $\mathcal{H}^m \sigma_U^n(x) = \lambda_n^m \sigma_U^n(x)$. Функциональный оператор \mathcal{H}^m фигурирует в уравнениях (469) и (470) и, принимая во внимания его свойства, описанные выше, можно сразу написать выражение для $Q_0(x_1x_2)$:

$$Q_0(x_1x_2) = \mathcal{L}_{U_1}(x_1) \mathcal{L}_{U_2}(x_2) \quad (475)$$

Для решения функционального уравнения (470) запишем искомую функцию $Q_2(x_1x_2)$ в виде разложения по собственным функциям оператора (471):

$$Q_2(x_1x_2) = \sum_{|n|+|l|\neq 0} C_{nl}\sigma_{U_1}^n(x_1)\sigma_{U_2}^l(x_2) \quad (476)$$

Подставляя этот ряд в левую часть уравнения (470) и производя с помощью (474) разложение его правой части, получаем для коэффициентов C_{nl} , входящих в (476), следующие формулы:

$$C_{nl} = \frac{1}{1 - \lambda_n^m(U_1)\lambda_l^m(U_2)} \frac{M_2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left[J_n(U_1 \varepsilon) J_l(U_2 \varepsilon) \right]_{\varepsilon=0} \quad (477)$$

где $J_n(U \varepsilon)$ (не путать с (360)!) определяются как

$$J_n(U \varepsilon) \equiv \int \frac{\mathcal{L}_U(\mathcal{R}_{U-\varepsilon}(x)) \mathcal{R}'_{U-\varepsilon}(x)}{G_U^n(x)} dx = \int \frac{\mathcal{L}_U(z)}{G_U^n(\mathcal{R}_{U-\varepsilon}^{-1}(z))} dz = J_{-n}^*(U \varepsilon) \quad (478)$$

При разложение правой части (470) мы использовали выражение (475) для функции $Q_0(x_1x_2)$.

Как было сказано выше, нас интересует только сингулярная по $\omega = U_2 - U_1$ часть $Q_2(x_1x_2)$. Для выделения этой части в формуле (476) следует сохранить только слагаемые с $n = -l$, поскольку только для этих слагаемых знаменатель $1 - \lambda_n^m(U_1)\lambda_l^m(U_2)$ в выражениях (477) обращается в нуль при $\omega = U_2 - U_1 = 0$. Расчет, полностью аналогичный выполненному в предыдущей главе диссертационной работы, приводит к следующему выражению для входящей в формулу (465) функции $\mathcal{F}_U(x_1x_2)$:

$$\mathcal{F}_U(x_1x_2) = -\frac{iM_2}{4m} \sqrt{4 - U^2} \sum_{n \neq 0} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left| J_n(U \varepsilon) \right|_{\varepsilon=0}^2 \frac{\sigma_U^n(x_1)\sigma_U^{-n}(x_2)}{n} \quad (479)$$

Приведем теперь явные выражения для интегралов (478):

$$J_0(U, \varepsilon) = 1, \quad J_n(U \varepsilon) = G_U^{-n} \left(\mathcal{R}_{U-\varepsilon}^{-1}(R_U) \right) = [J_1(U, \varepsilon)]^n \quad n > 0 \quad (480)$$

Эти выражения получаются интегрированием (478) по вычетам, причем для вычисления входящих в (479) производных, величину ε можно считать настолько малой, что расположение полюсов подынтегральных выражений по отношению к вещественной оси от нее не зависит.

Пользуясь приведенными в [33] свойствами функций $G_U(x)$ (472) можно получить следующее соотношение

$$\frac{1}{G_U^n(\mathcal{R}_U^{-1}(z))} = \lambda_1^{nm} \frac{1}{G_U^n(z)} = \lambda_1^{mn} \left(\frac{R_U - z}{R_U^* - z} \right)^n \quad (481)$$

из которого следует, что $J_n(U, 0) = 0$ при $n \neq 0$ и что в общем случае разложение $G_U^{-1}(\mathcal{R}_{U-\varepsilon}^{-1}(R_U))$ по степеням ε начинается с первой степени ε и может быть записано в следующем виде:

$$G_U^{-1}(\mathcal{R}_{U-\varepsilon}^{-1}(R_U)) = J_1(U, \varepsilon) = K_U \varepsilon + T_U \varepsilon^2 + O(\varepsilon^3) \quad (482)$$

Подстановка этого выражения в формулу (480) показывает, что в сумме (479) остаются только слагаемые, содержащие $J_{\pm 1}(U\varepsilon)$, для которых вторая производная их квадрата модуля отлична от нуля при $\varepsilon = 0$. Таким образом, выражение (479) для функции $\mathcal{F}_U(x_1 x_2)$ может быть преобразовано виду:

$$\mathcal{F}_U(x_1 x_2) = -\frac{iM_2}{2m} \sqrt{4-U^2} |K_U|^2 \left[\sigma_U^1(x_1) \sigma_U^{-1}(x_2) - \sigma_U^{-1}(x_1) \sigma_U^1(x_2) \right] \quad (483)$$

Прямое алгебраическое вычисление, использующее явные выражения (472) для функции $G_U(x)$ и (452) для преобразования $\mathcal{R}_U^{-1}(x)$, показывает что

$$K_U = \frac{R_U^{m+1}}{4-U^2} [(R_U^*)^m - R_U^m], \quad |K_U|^2 = 4 \left(\frac{\sin m\varphi}{4-U^2} \right)^2 \quad (484)$$

Наконец, используя следующие выражения для моментов и предельных значений функций $\sigma_U^n(x)$

$$\int \sigma_U^n(x) x dx = \frac{i}{2} \frac{n}{|n|} \sqrt{4-U^2} \quad \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \sigma_U^n(a) = \frac{\sqrt{4-U^2}}{2\pi}, \quad (485)$$

с помощью формулы (466) получаем для функции участия $W(U)$ и величины D выражения (435).

0.6.5 Точки делокализации

Как уже отмечалось во вводной части данной главы, появление предсказываемых формулой (435) "точек делокализации" (436) представляется удивительным, принимая во внимание известное утверждение о том, что в одномерной случайной системе все состояния локализованы [19]. Тот факт, что рассчитанный во втором порядке теории возмущений характер состояний (локализованный - делокализованный) гамильтониана (432) в этих энергетических точках оказывается таким же, как и в полностью упорядоченной системе, свидетельствует о том, что для исследования состояний с энергиями (436) следует проанализировать статистику функций Грина с точностью до членов более высокого порядка чем Δ^2 . Полный анализ такого рода оказывается весьма громоздким. Тем не менее, с

помощью приводимых ниже простых соображений оказывается возможным предсказать поведение функции участия $W(U)$ именно в окрестности точек \mathcal{E}_n (436), где (как это было показано выше) с точностью до членов, имеющих порядок старше Δ^2 , она обращается в нуль (435).

Допустим, что нечетные моменты функции распределения энергий узлов $P(\varepsilon)$ (464) равны нулю ($M_{2n+1} = 0$) и рассмотрим поправку четвертого порядка Q_4 в разложение (467) совместной статистики функций Грина. Функциональное уравнение для этой поправки получается также как уравнение (470) для Q_2 и имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta^4 : \quad & Q_4(x_1 x_2) - Q_4 \left[\mathcal{R}_{U_1}(x_1), \mathcal{R}_{U_2}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2}(x_2)}{dx_2} \right| = \quad (486) \\ & = \frac{M_2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left\{ Q_2 \left[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right| \right\}_{\varepsilon=0} + \\ & + \frac{M_4}{4!} \frac{\partial^4}{\partial \varepsilon^4} \left\{ Q_0 \left[\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1), \mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1-\varepsilon}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2-\varepsilon}(x_2)}{dx_2} \right| \right\}_{\varepsilon=0} \end{aligned}$$

Правая часть этого уравнения представляет собой сумму вкладов, причем, если зависимость какого-либо из них от энергетических аргументов $U_{1,2}$ имеет особенность, то такую особенность будет иметь и искомая функция $Q_4(x_1 x_2)$. Мы сейчас покажем, что некоторые члены ряда (476) для входящей в правую часть (486) функции $Q_2(x_1 x_2)$ расходятся при значениях их энергетических аргументов $U_{1,2}$ равных \mathcal{E}_n (436).

С помощью формул (477), (480) и (482) можно убедиться в том, что из коэффициентов C_{nl} (477) отличными от нуля будут только $C_{11} = C_{-1,-1}^*$, $C_{1,-1} = C_{-1,1}^*$, $C_{1,0} = C_{-1,0}^*$, $C_{0,1} = C_{0,-1}^*$, $C_{\pm 2,0}$, $C_{0,\pm 2}$. Напишем выражение, например, для $C_{1,0}$. Формула (477) дает:

$$C_{1,0} = \frac{M_2 T_{U_1}}{1 - \lambda_1^m(U_1)}, \quad (487)$$

где T_{U_1} определяется формулой (482). Нетрудно убедиться в том, что $\lambda_1(\mathcal{E}_n)^m = 1$ (472) и $T_{\mathcal{E}_n} \neq 0$ (482). Это и приводит к упомянутой выше расходимости $Q_4(x_1 x_2)$ при $U_1 = \mathcal{E}_n$, которая, в свою очередь, приводит к расходимости поправки $\sim \Delta^4$ к функции участия $W(U)$. Члены разложения $Q_2(x_1 x_2)$, пропорциональные $C_{-1,0}$, $C_{0,1}$ и $C_{0,-1}$, также расходятся при $U_{1,2} = \mathcal{E}_n$ (436), причем компенсации расходимостей не происходит.

Характер спектрального поведения других членов разложения $Q_2(x_1 x_2)$ при $U_{1,2} = \mathcal{E}_n$ (436) существенно иной. Например, коэффициент $C_{1,1}$, определяемый соотношением

$$C_{1,1} = M_2 \frac{K_{U_1} K_{U_2}}{1 - \lambda_1^m(U_1) \lambda_1^m(U_2)}, \quad (488)$$

стремится к нулю при $U_{1,2} = \mathcal{E}_n$ (436), поскольку произведение $K_{U_1}K_{U_2}$ стремиться к нулю быстрее чем $1 - \lambda_1^m(U_1)\lambda_1^m(U_2)$. Появление расходимостей возможно и в энергетических точках, отличных от \mathcal{E}_n (436), где связанные с ними особенности функции $W(U)$, однако, не столь заметны, поскольку вычисленная во втором порядке по Δ функция $W(U)$ в этих точках отлична от нуля.

Описанная выше расходимость должна проявляться в том, что функция участия $W(U)$ при энергиях $U = \mathcal{E}_n$ (436), может испытывать сильные отклонения от формулы (435), причем размер спектральных областей вблизи точек \mathcal{E}_n (436), где поправка $\sim \Delta^4$ (и, возможно, поправки более высокого порядка) начинают превосходить вычисленную в данной работе поправку $\sim \Delta^2$ (435), будет убывать при уменьшение беспорядка Δ . Поскольку вычисленная в работе поправка $\sim \Delta^2$ к функции участия $W(U)$ обращается в нуль при $U = \mathcal{E}_n$ (436), то расходящиеся поправки более высокого порядка должны приводить к появлению узких (при малых значениях Δ) максимумов в этих спектральных точках. Количественное описание амплитуды и формы этих максимумов, по-видимому, требует суммирования бесконечных подпоследовательностей членов описанной выше теории возмущений для уравнения (450) и выходит за рамки диссертационной работы.

0.6.6 Численный эксперимент

Все полученные выше результаты относятся к случаю *бесконечной* одномерной цепочки, поэтому при компьютерной проверке этих результатов следует использовать матрицы (432) настолько большого размера, что вычисленные для них величины (433) и (434) уже перестают от него зависеть. При выборе размера матриц для численных экспериментов можно руководствоваться наглядным смыслом формул (435), который мы сейчас опишем

35. Качественная картина изучаемой в данной главе диссертационной работы динамики возбуждения заключается в том, что указанное возбуждение, будучи полностью сосредоточенным на крайнем узле N при $t = 0$, остается локализованным вблизи этого узла и при $t \rightarrow \infty$. При этом соответствующая волновая функция оказывается существенно отличной

³⁵Все приведенные ниже замечания, разумеется, приложимы и к численным экспериментам, описанным в предыдущей главе диссертации.

от нуля лишь на некотором конечном числе узлов L вблизи крайнего узла. Вычисленная выше величина $D = \langle |\Psi_N(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle$ (294) и условие нормировки волновой функции дают возможность оценить число L как $L \sim 1/D$ и ввести следующее естественное определение *среднего радиуса локализации* $\langle L \rangle$:

$$\langle L \rangle \equiv \frac{1}{D} = \frac{2m}{M_2 \Delta^2} \quad (489)$$

Очевидно, что при численных экспериментах размер матриц N должен существенно превосходить $\langle L \rangle$.

Вычисленная в этой главе диссертации функция участия $W(U)$ (435) позволяет судить о *спектральной зависимости радиуса локализации*. Например, если при некотором значении энергии U функция $W(U)$ в k раз меньше ее среднего значения (равного D/V_0 , где $V_0 \approx 4$ – ширина спектра матрицы (432)), то можно сказать³⁶, что радиус $l(U)$ локализации состояний с энергией U в k раз больше $\langle L \rangle$, т.е. $l(U) = 1/[V_0 W(U)]$. Из этого следует, что полученная численно функция $W(U)$ может сильно отклоняться от формулы (435) вблизи "точек делокализации" $U = \mathcal{E}_n$ (436), поскольку радиус локализации состояний с энергиями близкими к \mathcal{E}_n существенно превосходит средний $\langle L \rangle$ и может стать больше размера N матриц, используемых в численном эксперименте.

Приведенные соображения показывают причины, по которым минимальный размер матрицы, которую можно использовать для проверки, *убывает* с увеличением степени разупорядочения Δ . С другой стороны, очевидно, что пренебречь членами более высокого порядка, чем второй, в формулах (435) возможно лишь тогда, когда $D \ll 1$, что имеет место только при малых Δ . Поэтому степень разупорядочения Δ и размер матриц N при численной проверке должны во всяком случае удовлетворять следующему условию:

$$\frac{1}{N} \ll \frac{M_2 \Delta^2}{2m} \ll 1 \quad (490)$$

Многочисленные компьютерные эксперименты с матрицами (432) различного размера N и с различной степенью диагонального разупорядочения Δ подтверждают сделанные выше качественные заключения.

³⁶Приводимое рассуждение относится к спектральным областям, где нормированная на единицу плотность состояний не слишком отличается от своего среднего значения $1/V_0$ и справедливо практически везде за исключением краев энергетического спектра.

При компьютерной проверке для получения статистики узельных энергий (464) мы использовали функцию $p(x) = \Theta(x + 0.5) - \Theta(x - 0.5)$, $M_2 = 1/12$. На рис.24 показаны спектральные зависимости функции $W(U)dU$, полученные численно по формуле (434) (зашумленные графики) и результаты расчета по формуле (435) (гладкие кривые). Расчеты проводились при $\Delta = 0.5$, $dU = 1/50$, $m = 2$ (рис.24а) и $m = 3$ (рис.24б). Размер матриц составлял $N = 4000$, причем производилось усреднение по 100 реализациям. Из рис.24а,б видно, что имеет место хорошее соответствие численных и теоретических зависимостей (435), причем на обоих рисунках отчетливо наблюдаются "точки делокализации" (436). Узкие максимумы численных графиков в этих точках соответствуют качественным предсказаниям, приведенным в предыдущем разделе. На рис.24с показаны результаты аналогичных расчетов для разупорядоченной цепочки с $m = 3$ и $\Delta = 0.25$. В этом случае формула (489) дает $\langle L \rangle = 1152$ и при $N = 4000$ условие (490) выполняется сравнительно слабо. Из рис.24с видно, что в спектральных областях вблизи точек делокализации, где радиус локализации состояний превосходит $\langle L \rangle$ (489) и становится сравнимым с N , расхождение результатов численного эксперимента с теоретической кривой более заметно, чем вдали от указанных точек.

Как и везде в данной диссертационной работе, при расчетах не проводилось никакой подгонки.

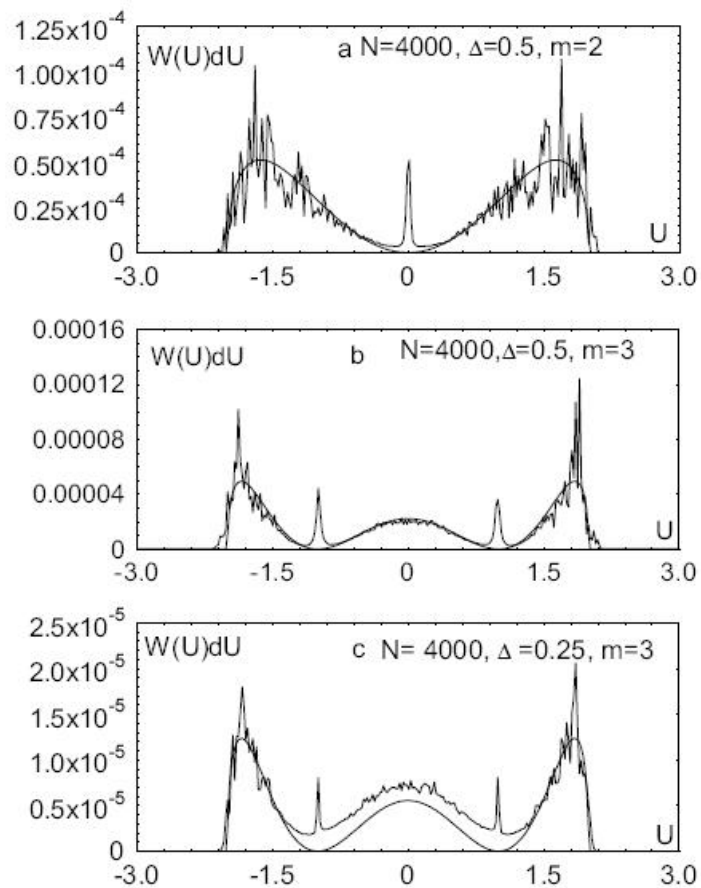


Рис. 24: Распределение степени локализации состояний в одномерных разупорядоченных цепочках со сложной структурной единицей. Зашумленные зависимости получены компьютерным моделированием, гладкие кривые – при помощи формулы (435). Размер случайных матриц во всех случаях $N = 4000$. Значения прочих параметров следующие: (а) $\Delta = 0.5, m = 2$, (b) $\Delta = 0.5, m = 3$, (с) $\Delta = 0.25, m = 3$. Во все случаях $dU = 1/50$.

0.7 СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ЛЛОЙДА

0.7.1 Введение, постановка задачи и основные результаты

Как уже отмечалось выше, физика разупорядоченных систем характеризуется отсутствием универсальных подходов к решению возникающих в ней модельных задач. Поэтому описанная выше методика анализа локализационных свойств одномерных случайных систем, с помощью которой в главах 4 и 5 диссертации были проанализированы локализационные свойства существенно различных типов разупорядоченных моделей (бинарно разупорядоченная система с произвольной энергией дефекта, слабаразупорядоченная система с простой и сложной структурной единицей), представляет определенный интерес, как обладающая известной универсальностью. В данной главе диссертации эта методика, использующая построение совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, будет применена для исследования еще одного типа разупорядоченных моделей, отличающегося от рассмотренных ранее, и принадлежащего, как говорят, к другому "классу универсальности". Матрица гамильтониана \mathbf{H} моделей этого класса имеет стандартный вид

$$H_{rr'} = \delta_{rr'}\varepsilon_r + \delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}, \quad r, r' = 1, 2, \dots, N, \quad N \rightarrow \infty, \quad (491)$$

а специфика заключается в том, что функция распределения $P(\varepsilon)$ случайных узельных энергий ε_r может убывать (при $\varepsilon \rightarrow \pm\infty$) настолько медленно, что все ее четные моменты, кроме нулевого, расходятся. Примером подобной модели может служить модель Ллойда[16], в которой $P(\varepsilon)$ является распределением Коши. Как известно,[16, 19] для модели Ллойда возможно точное вычисление усредненной функции Грина (см. формулу (51)), однако, несмотря на то, что локализация собственных состояний в такой модели активно исследовалась [47, 48, 69, 50, 51, 46], полученные ниже результаты, касающиеся спектральной зависимости степени локализации в смысле критерия Андерсона, по нашим сведениям, нигде не освещались. Отметим, что изучение подобных моделей представляет методический интерес, поскольку использование обычной теории возмущений в данном

случае оказывается невозможным. Кроме того, существуют физические механизмы беспорядка, приводящие к слабоубывающей статистике узельных энергий[71].

Для анализа локализации в моделях описанного выше класса мы применим изложенную в предыдущих главах диссертации методику [41], основанную на построении совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. В настоящей главе работы будет произведено обобщение этой методики на случай диагонально разупорядоченных 1D моделей описанного выше класса, когда приведенные ранее формулы (296), выражающие критерий Андерсона D и спектральную зависимость локализации $W(U)$ через второй момент функции распределения узельных энергий $\int P(\varepsilon)\varepsilon^2 d\varepsilon$, оказываются неприменимыми. В качестве примера мы приводим расчеты для модели Ллойда и показываем, что зависимость критерия Андерсона от параметра ширины распределения узельных энергий в этом случае *линейная*, а не квадратичная (296), как для быстро убывающих распределений[41].

Общая постановка задачи и количественные определения вычисляемых ниже величин[41] в точности соответствуют таковым из двух предыдущих глав диссертации, поэтому здесь мы ограничимся лишь кратким напоминанием. Рассмотрим длинную разупорядоченную цепочку, описываемую гамильтонианом (491), и будем считать, что в начальный момент времени $t = 0$ возбуждение было сосредоточено на крайнем узле N этой цепочки. Введем *критерий Андерсона* D как вероятность того, что возбуждение останется на исходном узле N при $t \rightarrow \infty$. Как известно, в упорядоченной системе $D = 0$ и появление (вследствии беспорядка) в спектре гамильтониана (491) локализованных состояний соответствует условию $D \neq 0$ [31, 19, 41].

Если Ψ^λ и E_λ суть собственные векторы и собственные числа матрицы (491), то величина D может быть представлена в виде (293)

$$D = \int W(U)dU, \quad \text{где} \quad W(U)dU = \left\langle \sum_{E_\lambda \in [U, U+dU]} \left| \Psi_N^\lambda \right|^4 \right\rangle \quad (492)$$

Скобки $\langle \rangle$ показывают усреднение по случайным узельным энергиям ε_r . Отличие функции $W(U)$ от нуля при какой-либо энергии U свидетельствует о том, что собственные векторы (491) с энергией U локализованны в смысле критерия Андерсона. Поэтому эту функцию можно назвать *спектральной зависимостью степени локализации*.³⁷

³⁷Выше мы, в соответствии с терминологией работы [41], называли $W(U)$ функцией участия, поскольку

Как и ранее, функцию распределения энергий узлов $P(\varepsilon)$ мы представим в виде

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\Delta} p\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right), \quad p(x) > 0, \quad \int p(x) dx = 1 \quad (493)$$

причем Δ является мерой разупорядочения системы, т.к. при $\Delta \rightarrow 0$ система становится упорядоченной. В предыдущих главах работы были получены следующие выражения (296) для D и $W(U)$: $D = M_2 \Delta^2 / 2$ и $W(U) = M_2 \Delta^2 \sqrt{(4 - U^2)} / 4\pi$, $|U| < 2$, где $M_2 = \int p(x) x^2 dx$. При $M_2 < \infty$ эти выражения применимы в случае слаборазупорядоченных систем, когда $D \ll 1$. Основным результатом данной главы диссертационной работы являются следующие применимые при $D \ll 1$ выражения для функции $W(U)$ и величины D :

$$W(U) = \frac{(4 - U^2)^{3/2}}{4\pi} \int d\varepsilon P(\varepsilon) \ln\left(1 + \frac{\varepsilon^2}{4 - U^2}\right), \quad |U| < 2, \quad D = \int_{-2}^2 dU W(U) \quad (494)$$

Эти выражения справедливы при фактически любой мыслимой функции $P(\varepsilon)$. При $M_2 < \infty$ формулы (494) переходят (при малых Δ) в формулы (296), полученные ранее. При $M_2 = \infty$ зависимость D от Δ качественно меняется. В частности, для модели Ллойда, когда $p(x) = [\pi(1 + x^2)]^{-1}$, величина D оказывается пропорциональной первой степени Δ , что подтверждается описанным в заключительной части главы компьютерным экспериментом.

0.7.2 Расчет

Для решения задачи, поставленной в предыдущем разделе, мы будем использовать разработанную выше методику, которую мы сейчас кратко напомним в удобной для настоящей главы диссертации форме. Вероятность возбуждения $|\Psi_N(t)|^2$ на краевом узле N разупорядоченной цепочки выражается через две крайевых функции Грина (КФГ) $\gamma(U_1)$ и $\gamma(U_2)$ при разных энергиях U_1 и U_2 . Указанные КФГ являются случайными величинами, причем их совместная функция распределения $\rho(x_1 x_2)$ удовлетворяет уравнению (308):

$$x_1^2 x_2^2 \rho(x_1 x_2) = \int P(\varepsilon) \rho(U_1 - 1/x_1 - \varepsilon, U_2 - 1/x_2 - \varepsilon) d\varepsilon \quad (495)$$

Искомая вероятность возбуждения на краевом узле $|\Psi_N(t)|^2$ связана с функцией $\rho(x_1 x_2) = \rho_{U_1 U_2}(x_1 x_2)$ следующим образом (эти соотношения получаются из формулы (311), в которой $W(U)$ имеет много общего с inverse participation ratio (IPR)[44].

рой учитывается, что функция ρ удовлетворяет уравнению(495)):

$$|\Psi_N(t)|^2 = \frac{i}{\pi^2} \int dU d\omega e^{-\omega t} \langle y_2 x_1 \rangle, \quad \text{где} \quad \langle y_2 x_1 \rangle = \pi \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int x \rho_{U, U+\omega}(x, a) dx \quad (496)$$

При малых ω функция $\rho_{U, U+\omega}(x_1, x_2)$ имеет сингулярность типа полюса, т.е. представима в виде

$$\rho_{U, U+\omega}(x_1 x_2) \approx \text{sing} \rho_{U, U+\omega}(x_1 x_2) = \frac{1}{\omega} \mathcal{F}_U(x_1 x_2) \quad (497)$$

Подставляя (497) в (496) и учитывая что $\int d\omega e^{-\omega t} / \omega = -i\pi$, получаем, что предельная при $t \rightarrow \infty$ вероятность возбуждения на крайнем узле D (492) определяется формулой:

$$D = |\Psi_N(t = \infty)|^2 = \int W(U) dU, \quad \text{где} \quad W(U) = \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int dx \mathcal{F}_U(x, a) x \quad (498)$$

Причем, как было показано выше [41], функция $W(U)$ в этом выражении имеет смысл спектральной зависимости степени локализации (492). Таким образом, для вычисления D и $W(U)$ следует найти сингулярную по разности энергий ω часть (497) решения уравнения (495). Эти сведения из предыдущих глав работы являются исходными для данной главы. Ниже описывается схема расчета величин D и $W(U)$ в первом исчезающем приближении по степени разупорядочения Δ (493), пригодная для фактически произвольной осмысленной функции $p(x)$ (493), в том числе и тогда, когда все четные (кроме нулевого) моменты $p(x)$ расходятся. Как и при получении формул (296), *все расчеты относятся к области энергий* $|U| < 2$, где отлична от нуля плотность состояний упорядоченной модели и где находится подавляющее большинство состояний и в случае слабого беспорядка, который мы рассматриваем.

Нам будет удобно ввести функцию $\mathcal{R}(x_1 x_2) \equiv \rho(U_1 - x_1, U_2 - x_2)$. С помощью (495) нетрудно убедиться в том, что $\mathcal{R}(x_1 x_2)$ удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{\mathcal{R}(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2)}{x_1^2 x_2^2} \equiv \mathcal{H}_{U_1}(x_1) \mathcal{H}_{U_2}(x_2) \mathcal{R}(x_1 x_2) = \int P(\varepsilon) \mathcal{R}(x_1 + \varepsilon, x_2 + \varepsilon) d\varepsilon \quad (499)$$

В левой части этого уравнения фигурирует уже встречавшийся ранее функциональный оператор $\mathcal{H}_U(x)$, который действует на произвольную функцию $f(x)$ следующим образом: $\mathcal{H}_U(x)f(x) \equiv f(U - 1/x)/x^2$. Используем описанную в [33] (и в Приложении 2 данной диссертационной работы) систему собственных функций оператора $\mathcal{H}_U(x)$ для того, чтобы записать уравнение (499) в матричном виде. Приведем полученные в [33] (см. Приложение

2) явные выражения для собственных функций $\sigma_U^n(x)$ и собственных значений λ_n этого оператора при $|U| < 2$:

$$\sigma_U^n(x) = \mathcal{L}_U(x) \left[\frac{R_U^* - x}{R_U - x} \right]^n \equiv \mathcal{L}_U(x) G_U^n(x), \quad \lambda_n = \left(\frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{U - i\sqrt{4 - U^2}} \right)^n, \quad |\lambda_n| = 1 \quad (500)$$

где

$$G_U(x) \equiv \frac{R_U^* - x}{R_U - x} \quad R_U \equiv \frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad \mathcal{L}_U(x) \equiv \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - R_U} - \frac{1}{x - R_U^*} \right] \quad (501)$$

Нам понадобится также полученное в [33] (Приложение 2) правило проектирования на систему функций (500), которое заключается в том, что произвольная функция $f(x)$ может быть представлена в виде ряда:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \sigma_U^n(x), \quad \text{где } A_n = \int \frac{f(x)}{G_U^n(x)} dx \quad (502)$$

С помощью правила (502), разложим правую и левую части уравнения (499) по системе функций (500)

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(x_1 x_2) &= \sum_{nm} C_{nm} \sigma_{U_1}^n(x_1) \sigma_{U_2}^m(x_2), \quad \int P(\varepsilon) \mathcal{R}(x_1 + \varepsilon, x_2 + \varepsilon) d\varepsilon = \\ &= \sum_{qp} \sum_{nm} \sigma_{U_1}^q(x_1) \sigma_{U_2}^p(x_2) J_{qp}^{nm} C_{nm}, \quad \text{где } J_{qp}^{nm} \equiv \int P(\varepsilon) \frac{\sigma_{U_1}^n(\varepsilon + x_1) \sigma_{U_2}^m(\varepsilon + x_2)}{G_{U_1}^q(x_1) G_{U_2}^p(x_2)} dx_1 dx_2 d\varepsilon \end{aligned} \quad (503)$$

Приравнивая коэффициенты при функциях $\sigma_{U_1}^n(x_1) \sigma_{U_2}^m(x_2)$ в правой и левой частях (499), получим

$$C_{qp} \lambda_q(U_1) \lambda_p(U_2) = \sum_{nm} J_{qp}^{nm} C_{nm} \quad (504)$$

Пронумеруем пары индексов одним индексом $qp \rightarrow \alpha$, причем паре индексов $q = p = 0$ поставим $\alpha = 1$. Тогда, если обозначить $\lambda_q(U_1) \lambda_p(U_2) \equiv \Lambda_\alpha$, то уравнение (504) запишется в виде

$$\forall \alpha, \quad \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} C_{\beta} = 0, \quad M_{\alpha\beta} = J_{\alpha}^{\beta} - \Lambda_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} \quad (505)$$

Уравнение (505) и представляет собой искомый матричный эквивалент уравнения (499).

Решение уравнения (495) имеет смысл функции распределения и поэтому должно быть знакопостоянным. Аргументы, свидетельствующие о том, что *любое* решение (495) имеет определенный знак, приведены в Приложении 3. Покажем, что из этого следует, что все решения (495) пропорциональны друг другу, т.е. что многообразие решений уравнения

(495) одномерно. Действительно, допустим, что существуют два линейно независимых решения (495) ρ_1 и ρ_2 , которые без потери общности мы можем считать оба положительными. Но тогда решением будет и произвольная линейная комбинация $\rho = \rho_1 c_1 + \rho_2 c_2$, причем коэффициенты c_1 и c_2 можно выбрать разного знака, так что при некоторых значениях аргументов x_1 и x_2 функция ρ будет менять знак. Это противоречит полученному в Приложении 3 свойству знакопостоянства решений (495) и, следовательно, *двух (и более) линейно независимых решений у уравнения (495) (и связанных с ним уравнений (499) и (505)) быть не может.*

Для матричного уравнения (505) это утверждение соответствует тому, что у особой матрицы M (т.е. $\det M = 0$) все строки, кроме *одной*, являются линейно независимыми. Пусть линейно зависимой является строка матричного уравнения (505) соответствующая $\alpha = 1$. Поскольку $\int \sigma_U^n(x) dx = \delta_{n0}$ (см. Приложение 2 или [33]), то условие нормировки $\int dx_1 dx_2 \mathcal{R}(x_1 x_2) = 1$ соответствует требованию $C_{00} = 1 \rightarrow C_1 = 1$. Если теперь обозначить через L размер матрицы M (разумеется, при вычислениях следует считать $L \rightarrow \infty$), то нетрудно убедиться в том, что нормированное решение уравнения (505) может быть записано в виде

$$C_\alpha = K(\Delta) e_{\alpha, i_2, i_3, \dots, i_L} M_{2i_2} M_{3i_3} M_{4i_4} \dots M_{Li_L}, \quad L \rightarrow \infty \quad (506)$$

$$K(\Delta) = [e_{1, i_2, i_3, \dots, i_L} M_{2i_2} M_{3i_3} M_{4i_4} \dots M_{Li_L}]^{-1}, \quad L \rightarrow \infty$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование от 1 до L , а $e_{iklm\dots n}$ – символ Леви-Чивиты [105, 106, 107] (полностью антисимметричная функция значков).³⁸ Напомним i) что $e_{123\dots L} = 1$, ii) что перестановка двух любых значков приводит к изменению знака (например, $e_{21345\dots L} = -1$) и, следовательно, $e_{iklm\dots n} \neq 0$ только если среди значков $iklm\dots n$ нет совпадающих (например, $e_{11345\dots L} = 0$).

Допустим, что мы имеем дело с упорядоченной системой, т.е. $\Delta = 0$ и $P(\varepsilon) = \delta(\varepsilon)$. Тогда $J_\alpha^\beta(\Delta = 0) = \delta_{\alpha\beta}$ и, следовательно, $M_{\alpha\beta}(\Delta = 0) = \delta_{\alpha\beta}(1 - \Lambda_\alpha)$. Из формулы (506)

³⁸ Например, если $L = 3$, то двум линейно независимым строкам матрицы M можно сопоставить два непараллельных вектора \mathbf{a} и \mathbf{b} . Тогда решение (505) соответствует нахождению вектора \mathbf{c} , ортогонального этим двум. Этот вектор параллелен векторному произведению $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$, компоненты которого, как известно, могут быть записаны с помощью трехмерного тензора Леви-Чивиты: $c_i \sim e_{ijk} a_j b_k$.

получаем, что $C_\alpha(\Delta = 0) = \delta_{\alpha 1}$ (этот результат совпадает с [41]) и что

$$K(0) = \prod_{\alpha=1}^L (1 - \Lambda_\alpha)^{-1} \quad L \rightarrow \infty \quad (507)$$

При переходе к разупорядоченной системе, у матрицы M появляются недиагональные элементы, малые по беспорядку Δ в том смысле, что они обращаются в нуль при $\Delta \rightarrow 0$. Поэтому для получения первого не исчезающего приближения для коэффициентов C_α , в произведениях матричных элементов, входящих в (506), следует оставить только один какой-либо недиагональный элемент, а остальные (диагональные) взять невозмущенными. Что касается нормировочного коэффициента $K(\Delta)$, то при вычислении первой не исчезающей поправки, его следует положить равным $K(0)$ (507). При таком подходе характер малости (цело степенной, дробно степенной или какой-либо другой) недиагональных элементов матрицы M как функций Δ не играет роли. Таким образом, в первом не исчезающем приближении (мы показываем это приближенными равенствами) для коэффициентов C_α получается выражение

$$C_\alpha \approx K(0)[e_{\alpha, i_2, 3, 4, 5, \dots, L} J_2^{i_2} (1 - \Lambda_3)(1 - \Lambda_4) \dots (1 - \Lambda_L) + \quad (508)$$

$$+ e_{\alpha, 2, i_3, 4, 5, \dots, L} (1 - \Lambda_2) J_3^{i_3} (1 - \Lambda_4) \dots (1 - \Lambda_L) + e_{\alpha, 2, 3, i_4, 5, \dots, L} (1 - \Lambda_2)(1 - \Lambda_3) J_4^{i_4} (1 - \Lambda_5) \dots (1 - \Lambda_L) + \dots]$$

В первом слагаемом в квадратных скобках (508) недиагональный элемент стоит на месте M_{2i_2} (см. формулу (506)). Принимая во внимание явное выражение для $K(0)$ (507), нетрудно видеть, что это слагаемое может быть преобразовано следующим образом

$$K(0)e_{\alpha, i_2, 3, 4, 5, \dots, L} J_2^{i_2} (1 - \Lambda_3)(1 - \Lambda_4) \dots (1 - \Lambda_L) = e_{\alpha, i_2, 3, 4, 5, \dots, L} \frac{J_2^{i_2}}{1 - \Lambda_2}$$

Это выражение отлично от нуля только когда $\alpha = 1$ или $\alpha = 2$. Случай $\alpha = 1$ соответствует вычислению поправки к нормировочной константе и интереса для нас не представляет [41]. В случае $\alpha = 2$ и $i_2 = 1$ рассматриваемое слагаемое даст коэффициент C_2 , поскольку остальные слагаемые в (508) равны нулю при $\alpha = 2$. Аналогичные результаты могут быть получены для всех $\alpha \neq 1$:

$$C_\alpha \approx -\frac{J_\alpha^1}{1 - \Lambda_\alpha} \quad \alpha \neq 1 \quad (509)$$

Как уже было отмечено, нас интересуют только сингулярные по $\omega = U_2 - U_1$ члены разложения (503). Такая сингулярность имеет место только у тех коэффициентов (509), у которых номер α соответствует паре индексов с противоположными знаками, т.е. $\alpha \rightarrow n, -n$

(см. формулу (331) и текст перед ней). Сингулярность возникает как нуль знаменателя в (509) при $\omega = 0$, поэтому энергетические аргументы во всех величинах, кроме знаменателя (509), можно выравнять, положив $U_1 = U_2 \equiv U$. При этом величины J_α^1 будут определяться следующими интегралами:

$$J_\alpha^1 \rightarrow J_{-nn}^{00} = \int P(\varepsilon) \frac{\mathcal{L}_U(\varepsilon + x_1) \mathcal{L}_U(\varepsilon + x_2)}{G_U^n(x_1) G_U^{-n}(x_2)} dx_1 dx_2 d\varepsilon = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \left(\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + 4 - U^2} \right)^{|n|} \quad (510)$$

Интегралы по x_1 и x_2 , входящие в (510), уже встречались выше (см. формулу (336)). Таким образом для сингулярной части первой исчезающей поправки по беспорядку к функции $\mathcal{R}(x_1 x_2)$ (обозначим ее $\text{sing } \mathcal{R}(x_1 x_2)$) можно написать следующие выражения:

$$\text{sing } \mathcal{R}(x_1 x_2) = \sum_{n \neq 0} C_{-nn} \sigma_U^n(x_1) \sigma_U^{-n}(x_2) = - \sum_{n \neq 0} \frac{J_{-nn}^{00}}{1 - \lambda_n(U) \lambda_{-n}(U)} \sigma_U^n(x_1) \sigma_U^{-n}(x_2) \quad (511)$$

Для малых ω справедливо разложение (см. (500))

$$1 - \lambda_n(U) \lambda_{-n}(U + \omega) = - \frac{2in\omega}{\sqrt{4 - U^2}} + O(\omega^2) \quad (512)$$

поэтому

$$\text{sing } R(x_1 x_2) = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2i\omega} \sum_{n \neq 0} J_{-nn}^{00} \frac{\sigma_U^n(x_1) \sigma_U^{-n}(x_2)}{n} \quad (513)$$

откуда, используя свойство функций (500) $\sigma_U^n(U - x) = \sigma_U^{-n}(x)$, получаем следующее выражение для входящей в (497) функции $\mathcal{F}_U(x_1 x_2)$

$$\mathcal{F}_U(x_1 x_2) = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2i} \sum_{n \neq 0} J_{-nn}^{00} \frac{\sigma_U^{-n}(x_1) \sigma_U^n(x_2)}{n} \quad (514)$$

С помощью (514), (498) и (510) несложно получить, что

$$W(U) = -\frac{i}{2} \sqrt{4 - U^2} \sum_{n \neq 0} \int d\varepsilon \frac{P(\varepsilon)}{n} \left(\frac{\varepsilon^2}{\varepsilon^2 + 4 - U^2} \right)^{|n|} \int \sigma_U^n(x) x dx \lim_{a \rightarrow \infty} \sigma_U^{-n}(a) a^2 \quad (515)$$

Имея ввиду доказанные в [41] (см. Приложение 2) свойства функций (500)

$$\int \sigma_U^n(x) x dx = \frac{i}{2} \frac{n}{|n|} \sqrt{4 - U^2} \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \sigma_U^{-n}(a) a^2 = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\pi} \quad (516)$$

а также то, что фигурирующий в (515) ряд легко суммируется с помощью формулы $\sum_{n=1}^{\infty} q^n/n = -\ln(1 - q)$, получаем для функции $W(U)$ и величины D выражения (494)

В качестве примера рассмотрим модель Ллойда[16], когда $p(x) = [\pi(1 + x^2)]^{-1}$. Вычисляя по вычетам интеграл в (494), можно показать, что для этой модели:

$$W(U) = \frac{[4 - U^2]^{3/2}}{2\pi} \ln \left(1 + \frac{\Delta}{\sqrt{4 - U^2}} \right)$$

В актуальном для нас случае малых Δ , получаем, что $W(U) \approx (4 - U^2)\Delta/2\pi$ и $D \approx 16\Delta/3\pi$. Напомним, что для моделей с конечным вторым моментом M_2 , рассмотренных в предыдущих главах диссертации (см. формулы (296)), эти величины всегда пропорциональны Δ^2 . На рис.25 приведены зависимость критерия Андерсона D от беспорядка Δ (рис.25а) и спектральная зависимость степени локализации $W(U)dU|_{\Delta=0.007}$ (рис. 25b), полученные для модели Ллойда в компьютерном эксперименте.³⁹ Построенные там же соответствующие теоретические зависимости, полученные с помощью формул (494) без какой-либо подгонки, позволяют судить о правильности выполненных в настоящей главе диссертационной работы расчетов. Из рис.25а видно, что при малом беспорядке критерий Андерсона D для модели Ллойда действительно линейно зависит от параметра разупорядочения Δ .

0.7.3 Заключение

В данной главе диссертационной работы вычислены величина критерия Андерсона и спектральная зависимость степени локализации для 1D диагонально разупорядоченных моделей, у которых функция распределения энергий узлов $P(\varepsilon)$ не имеет конечных четных моментов кроме нулевого. Для вычислений производится обобщение предложенной в предыдущих главах методики построения совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина на случай случайных систем с расходящимися четными моментами функции $P(\varepsilon)$. Предложенная схема вычислений, опирающаяся на систему специальных функций [33] (см. Приложение 2), позволяет вычислять критерий Андерсона и спектральную зависимость степени локализации в тех случаях, когда обычная теория возмущений оказывается неприменимой. В качестве примера рассматривается модель Ллойда[16] для которой получена нетривиальная линейная зависимость критерия Андерсона от степени разупорядочения.

Сделаем здесь еще следующее замечание. Примененный в этой главе работы метод получения приближенного решения функциональных уравнений для совместной статистики функций Грина является более общим, чем метод (достаточно традиционный), использованный в предыдущих двух главах. Тем не менее, приведенное в предыдущих главах

³⁹Методика компьютерного эксперимента описана в Главе 4.

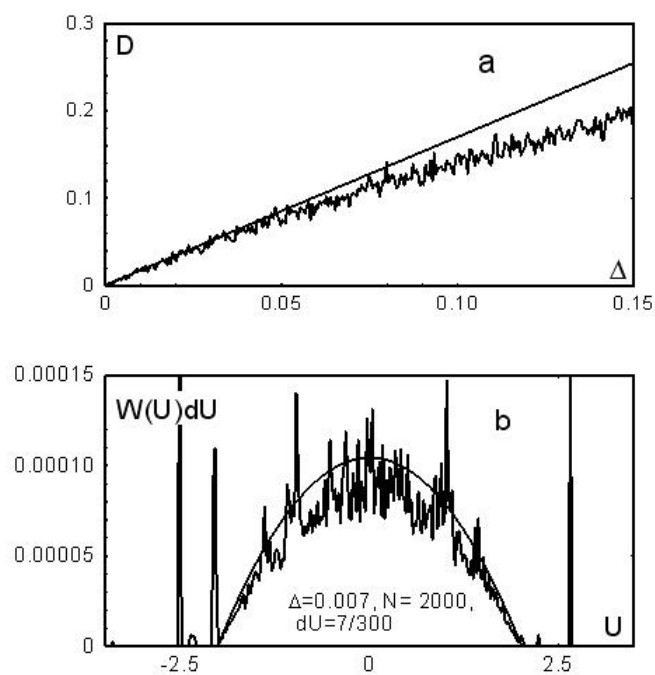


Рис. 25: (а) – зависимость критерия Андерсона D от параметра беспорядка Δ для модели Ллойда. Гладкая линия – расчет по формулам (494), зашумленная линия – компьютерный эксперимент. (б) – распределение степени локализации состояний $W(U)dU$ для одномерной модели Ллойда при $\Delta = 0.007$ и $dU = 7/300$. Гладкая кривая – расчет по формуле (494), зашумленная кривая – компьютерный эксперимент, при котором было выполнено усреднение по 2000 реализаций случайных матриц (491) размером $N = 2000$.

достаточно подробное изложение методики, основанной на традиционных концепциях теории возмущений, представляется целесообразным по следующей причине.

Методика данной главы относится к области спектра $|U| < 2$, актуальной в случае когда "энергетическая" величина беспорядка невелика и предложенная в нашей работе система специальных функций (см. Приложение 2) дает удобный базис для записи функциональных уравнений для статистики функций Грина в матричном виде. Однако, в случае, когда требуется найти решение этих уравнений в спектральной области $U > 2$ (как в задаче о бинарном беспорядке с произвольно большой энергией дефекта (см. главу 4, Приложение 1), построение такого базиса и матричных уравнений для статистики проблематично и требует дополнительного исследования, которое выходит за рамки данной диссертационной работы.

0.7.4 Приложение 3

Приведем аргументы показывающие, что, по крайней мере, в случае слабого беспорядка, любое решение уравнения (495) при $|U_{1,2}| < 2$ есть знакопостоянная функция. Из уравнения (495) непосредственно вытекает, что при $x_1, x_2 \rightarrow \pm\infty$ функция $\rho(x_1x_2) \approx x_1^{-2}x_2^{-2} \int d\varepsilon P(\varepsilon)\rho(U_1 - \varepsilon, U_2 - \varepsilon)$ и, следовательно, при больших по модулю x_1 и x_2 функция $\rho(x_1x_2)$ имеет определенный знак. Убедимся теперь в постоянстве знака функции $\rho(x_1x_2)$ при отсутствие беспорядка. Уравнение (495) в этом случае имеет вид

$$x_1^2x_2^2\rho(x_1x_2) = \rho(U_1 - 1/x_1, U_2 - 1/x_2) \quad (517)$$

Из (517) следует, что на множестве точек с координатами $(x_{1,n}, x_{2,n})$, таких что $x_{i,n+1} = U_i - 1/x_{i,n}$, $i = 1, 2$, функция $\rho(x_{1,n}, x_{2,n})$ сохраняет знак (стартовую точку $(x_{1,1}, x_{2,1})$ выберем в области больших по модулю x_1 и x_2 , где, в соответствии со сделанными выше замечаниями, постоянство знака имеет место). Процесс построения последовательности точек x_n по каждой переменной может быть наглядно представлен стандартным образом с помощью графиков функций $y = U - 1/x$ и $y = x$. На рис.26 показаны первые несколько шагов этого процесса. Как известно, точки x_n , получаемые последовательным применением отображения $x_{n+1} = U - 1/x_n$, при $|U| < 2$ (когда уравнение $x = U - 1/x$ не имеет вещественных решений) заполняют числовую ось с плотностью, определяемой рас-

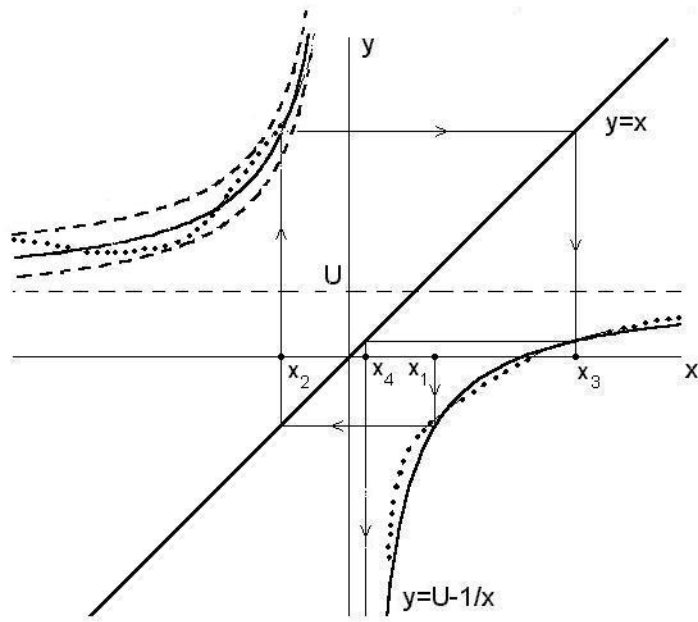


Рис. 26: Пояснения в тексте.

пределением Коши[33], которое нигде не обращается в нуль. Таким образом, при $n \rightarrow \infty$ точки $(x_{1,n}, x_{2,n})$ (в которых функция $\rho(x_1x_2)$ имеет один и тот же знак) "покрывают" всю плоскость x_1, x_2 и, следовательно, при отсутствии беспорядка функция $\rho(x_1x_2)$ знакопостоянна. Неоднозначность выбора стартовой точки дает дополнительные основания для такого заключения.

Аналогичное рассуждение возможно провести и в случае если имеет место малый беспорядок. Если функция распределения энергий узлов $P(\varepsilon)$ отлична от нуля только в некотором конечном интервале $[-a, a]$, (т.е. $\int_{-a}^a P(\varepsilon)d\varepsilon = 1$), то для произвольной функции $f(x)$ имеет место соотношение

$$\int P(\varepsilon)f(x - \varepsilon)d\varepsilon = f(x - \bar{\varepsilon}(x)), \quad (518)$$

причем функция $\bar{\varepsilon}(x)$ при любом x удовлетворяет условию $\bar{\varepsilon}(x) \in [-a, a]$. Если функция $P(\varepsilon)$ везде отлична от нуля, то соотношение (518) сохраняет силу, однако, о функции $\bar{\varepsilon}(x)$ можно сказать лишь, что она ограничена и стремится к нулю при уменьшении беспорядка (т.е. при $\Delta \rightarrow 0$ (493)). Имея это ввиду, уравнение (495) может быть переписано в виде

$$x_1^2 x_2^2 \rho(x_1 x_2) = \rho(U_1 - 1/x_1 - \bar{\varepsilon}, U_2 - 1/x_2 - \bar{\varepsilon}) \equiv \rho(\tilde{U}_1 - 1/x_1, \tilde{U}_2 - 1/x_2) \quad (519)$$

где $\bar{\varepsilon}(x_1x_2)$ – ограниченная функция $\varepsilon_{min} < \bar{\varepsilon}(x_1x_2) < \varepsilon_{max}$, стремящаяся к нулю при $\Delta \rightarrow 0$. Как видно, (519) отличается от (517) только заменой $U_{1,2}$ на $\tilde{U}_{1,2} \equiv U_{1,2} - \bar{\varepsilon}(x_1x_2)$, где функция $\bar{\varepsilon}(x_1x_2)$ мала при слабом беспорядке. Произведем теперь графическое построение системы точек $(x_{1,n}, x_{2,n})$, в которых функция $\rho(x_1x_2)$ сохраняет знак, аналогичное описанному выше для случая нулевого беспорядка. При этом следует заменить гиперболическую функцию $U - 1/x$ на функцию $U - \bar{\varepsilon}(x, z) - 1/x$, и при построении $x_{1,n+1}$ следует положить $x = x_{1,n}, z = x_{2,n}$, а при построении $x_{2,n+1}$ следует положить $x = x_{2,n}, z = x_{1,n}$. Схематически такая замена показана на рис.26 точечной кривой. При малом беспорядке указанная замена не может качественно изменить картину получения множества точек, в которых функция ρ имеет один и тот же знак, поскольку для предельных функций $U_{1,2} - \varepsilon_{min} - 1/x$ и $U_{1,2} - \varepsilon_{max} - 1/x$ (показанных на рис.26 пунктиром во втором квадранте) построение ничем не отличается от описанного выше для случая $\Delta = 0$. Качественное изменение было бы возможно, например, при появлении точек пересечения графиков функций $y = \tilde{U}(x) - 1/x$ и $y = x$. Однако при малом беспорядке (и, следовательно, при малой функции $\bar{\varepsilon}(x_1x_2)$), такая возможность может возникнуть лишь когда энергетические параметры $|U_{1,2}|$ находятся в малой области вблизи 2, размер которой стремится к нулю при $\Delta \rightarrow 0$. Для выполненных в настоящей главе диссертационной работы расчетов первого неисчезающего приближения для спектральной зависимости локализации $W(U)$ это несущественно.

0.8 СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С КУСОЧНО ПОСТОЯННЫМ СЛУЧАЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

0.8.1 Введение, постановка задачи и основные результаты

Как уже отмечалось в Главе 4 нашей диссертационной работы, в теории простейших твердотельных разупорядоченных моделей имеет смысл различать непрерывные и дискретные модели. Напомним, что непрерывные модели используют уравнение Шредингера $[-d^2/dx^2 + \mathcal{U}(x)]\psi = E\psi$ с тем или иным случайным потенциалом $\mathcal{U}(x)$, а дискретные модели строятся на основе некоторой случайной матрицы модельного гамильтониана, например, матрицы (4), являющейся основным объектом исследования нашей работы. Каждый из двух указанных типов моделей имеет свою специфику. Например, при анализе задач, связанных с колебаниями разупорядоченных цепочек [29, 30], употребляется дискретная модель, а при изучении распространения электромагнитных волн в разупорядоченной слоистой структуре более убедительной представляется непрерывная модель.

Для рассматриваемых в этих главах диссертации одномерных разупорядоченных моделей в целом ряде случаев удастся предложить математически корректные методы теоретического анализа [24, 36, 19], причем, как уже было сказано, особый интерес представляют случаи, когда с помощью *одного* метода оказывается возможным проанализировать *несколько* различных модельных задач и можно говорить об известной универсальности этого метода. В данной главе диссертационной работы теория возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, развитая и с успехом примененная в предыдущих главах для исследования дискретных моделей (являющихся основным объектом исследования диссертации), используется для анализа непрерывной разупорядоченной модели. Это еще раз показывает многосторонность предлагаемого в диссертации подхода к анализу локализационных свойств случайных систем.

Перейдем к описанию задачи, исследованной в настоящей главе. Рассмотрим одномерную непрерывную разупорядоченную модель с *кусочно постоянным* случайным потенциалом $\mathcal{U}(x)$, равном $u + \varepsilon_n$ внутри интервалов $x \in [b(n-1), bn], n = 1, 2, \dots, N$. Здесь ε_n независимые ограниченные случайные величины с известной функцией распределения $P(\varepsilon)$, а $u < 0$ – достаточно большое отрицательное число, чтобы $\mathcal{U}(x) < 0$ при $x \in [0, Nb]$. Длина b является заданным параметром потенциала $\mathcal{U}(x)$. При $x \in [0, Nb]$ мы полагаем $\mathcal{U}(x) = 0$. Функцию распределения $P(\varepsilon)$ случайных величин ε_n мы возьмем в следующем уже встречавшемся выше виде:

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\Delta} p\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right), \quad p(\varepsilon) > 0, \quad M_n \equiv \int p(\varepsilon) \varepsilon^n d\varepsilon, \quad M_0 = 1, \quad M_1 = 0 \quad (520)$$

Как обычно, параметр Δ является мерой разупорядочения и при $\Delta = 0$ функция $\mathcal{U}(x)$ представляет собой потенциальный ящик с плоским дном глубиной u и длиной Nb . При $\Delta > 0$ можно сказать, что функция $\mathcal{U}(x)$ соответствует *потенциальному ящику с флуктуирующим дном*. Всюду ниже, как обычно, подразумевается термодинамический предел $N \rightarrow \infty$.

Рассмотрим движение частицы в таком случайном потенциале и поставим следующую задачу, во многом сходную с рассмотренными в предыдущих главах. Пусть при $t = 0$ частица находилась в точке $r = Nb$ (т.е. на правом краю потенциального ящика с флуктуирующим дном) и требуется определить плотность вероятности D того, что частица останется в этой точке при $t \rightarrow \infty$. С математической точки зрения это означает, что при $t = 0$ волновая функция частицы имела вид $\Psi(t = 0, x) = \delta(x - r)$ и требуется найти $D = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle |\Psi(t, r)|^2 \rangle$. Как всегда, угловые скобки здесь и ниже обозначают усреднение по реализациям случайного потенциала $\mathcal{U}(x)$.

Как уже указывалось (см. Главу 4), если $\psi_n(x)$ суть собственные функции гамильтониана $H = -d^2/dx^2 + \mathcal{U}(x)$, то $D = \langle \sum_n |\psi_n(r)|^4 \rangle$.⁴⁰ Отличие D от нуля свидетельствует о том, что среди собственных функций гамильтониана H имеются *локализованные* (т.е. существенно отличные от нуля в некоторой конечной области, размер которой независит от N при $N \rightarrow \infty$) функции [41, 19, 31] (см. также Главу 4). Как и в предшествующих главах, для характеристики спектрального распределения степени локализации состояний

⁴⁰Можно также показать, что в выражение для D учитываются только состояния дискретной части спектра оператора $H = -d^2/dx^2 + \mathcal{U}(x)$.

непрерывной модели, мы будем использовать функцию участия $W(U)$, определенную как $W(U)dU = \langle \sum_{n, E_n \in [U, U+dU]} |\psi_n(r)|^4 \rangle$, где E_n – собственные энергии гамильтониана H . При этом смысл этой функции такой же, как и в случае дискретных моделей (см. Главу 4): если собственные функции гамильтониана H с энергией U делокализованы, то $W(U) = 0$, и $W(U) \neq 0$ в противном случае. Ниже мы будем иногда называть функцию участия $W(U)$ также *спектральной зависимостью степени локализации*.

Основными результатами этой главы диссертационной работы являются следующие выражения для функции $W(U)$ и величины D :

$$W(U) = \Theta(-U)\Theta(U - u) \left(\frac{\Delta}{u} \right)^2 \frac{M_2}{2\pi} \frac{\sin^2 b\sqrt{U - u}}{b\sqrt{U - u}} + O(\Delta^3), \quad u < 0 \quad (521)$$

$$D = \int_u^0 W(U)dU = \left(\frac{\Delta}{u} \right)^2 \frac{M_2}{2\pi b} \left(\sqrt{-u} - \frac{\sin[2b\sqrt{-u}]}{2b} \right) + O(\Delta^3), \quad (522)$$

применимые для описанной выше одномерной непрерывной модели с кусочно постоянным случайным потенциалом.

Заканчивая введение к данной главе диссертации, заметим, что уравнение Гельмгольца, описывающее распространение электромагнитных волн в слоистой системе, фактически совпадает с уравнением Шредингера, исследованном в этой главе нашей работы. Это дает основания полагать, что полученные в настоящей работе результаты могут быть использованы при исследовании распространения электромагнитных волн в одномерных фотонных кристаллах при наличии беспорядка.

0.8.2 Непрерывная модель. Общие свойства функций Грина уравнения Шредингера.

Для решения поставленной выше типичной задачи теории разупорядоченных систем мы применим метод совместной статистики опережающей и запаздывающей краевой функции Грина (КФГ) [41, 52], использованный в предыдущих главах для анализа дискретных одномерных разупорядоченных моделей. Ключевым в указанном методе является тот факт, что в дискретной одномерной модели, КФГ цепочки, увеличенной на одну структурную единицу, алгебраически выражается через КФГ исходной цепочки [19, 24, 52]. В

этом разделе мы кратко напомним сведения[19], относящиеся к функции Грина дифференциального уравнения Шредингера с гамильтонианом

$$H \equiv -d^2/dx^2 + \mathcal{U}(x) \quad (523)$$

а в следующем приведем подобное соотношение для КФГ, справедливое в случае непрерывной модели с кусочно постоянным потенциалом $\mathcal{U}(x)$.

Функция Грина оператора (523) определяется выражением:

$$G_{xx'}(\Omega) \equiv \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{\Omega - E_n} + \int dp \frac{\phi_p(x)\phi_p^*(x')}{\Omega - \mathcal{E}_p} \quad (524)$$

где $\psi_n(\phi_p)$ и $E_n(\mathcal{E}_p)$ соответственно собственные функции и собственные значения оператора (523), относящиеся к дискретной (непрерывной) части его спектра. При этом $n(p)$ является дискретным (непрерывным) номером собственной функции. Энергетический аргумент Ω функции Грина является в общем случае комплексным числом: $\Omega = U - iV$ (где U и V вещественные). С помощью формулы (524) можно показать, что решение $\Psi(t, x)$ временного уравнения Шредингера $i\dot{\Psi} = H\Psi$ с начальным условием $\Psi(0, x) = \Psi_0(x)$ может быть выражено через функцию Грина (524) следующим образом:

$$\Psi(t, x) = \lim_{V \rightarrow +0} \frac{1}{2\pi i} \int dU dx' e^{iUt} G_{xx'}(U - iV) \Psi_0(x'), \quad t > 0 \quad (525)$$

Прямая проверка показывает, что функция Грина (524) удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\left[\Omega + \frac{d^2}{dx^2} - \mathcal{U}(x) \right] G_{xx'}(\Omega) = \delta(x - x') \quad (526)$$

причем следует брать *убывающее* при $x \rightarrow \pm\infty$ решение этого уравнения с тем, чтобы обеспечить сходимость интегралов (525). Имея ввиду приведенные свойства функции Грина, можно убедиться в том, что введенная в первом разделе величина D выражается через произведение *диагональных элементов* опережающей и запаздывающей⁴¹ краевых функций Грина следующим образом:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle |\Psi(t, r)|^2 \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi^2} \int dU_1 dU_2 e^{i(U_1 - U_2)t} \langle G_{rr}(U_1 - iV_1) G_{rr}(U_2 + iV_2) \rangle, \quad (527)$$

причем здесь r – координата правого края описанного во введении потенциального ящика с флуктуирующим дном. Пользуясь спектральным разложением (524) можно показать,

⁴¹т.е. имеющих разные знаки мнимых частей энергетических аргументов

что D определяется только дискретными состояниями гамильтониана (523)[19], причем справедлива формула, аналогичная приведенной в Главе 4 диссертации (см. также, например, [41]):

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle |\Psi(t, r)|^2 \rangle = \left\langle \sum_n |\psi_n(r)|^4 \right\rangle \quad (528)$$

Ограничение области интегрирования в (527), при котором $U_{1,2} \in [U, U + dU]$, (см. замечание после формулы (306) в Главе 4) позволяет получить введенную в главе 4 функцию участия $W(U)$

$$W(U)dU = \left\langle \sum_{E_n \in [U, U+dU]} |\psi_n(r)|^4 \right\rangle \quad (529)$$

Как уже отмечалось, отличие функции $W(U)$ от нуля свидетельствует о наличие локализованных состояний в энергетическом интервале $[U, U + dU]$. В противном случае $W(U)$ равна нулю.

0.8.3 Случай кусочно постоянного потенциала. Рекуррентное соотношение для краевой функции Грина.

Рассмотрим следующее семейство случайных потенциалов, кусочно постоянных на интервалах числовой оси длиной b ⁴²

$$\mathcal{U}_m(x) = \begin{cases} u + \varepsilon_n, & \text{если } x \in [b(n-1), bn], \text{ при } x \leq mb \quad (u < 0, n - \text{целое}) \\ 0, & \text{если } x > mb \end{cases} \quad (530)$$

Здесь ε_n – независимые ограниченные случайные величины, имеющие функцию распределения $P(\varepsilon)$ (520), а u – достаточно большое отрицательное число, такое что всегда $u + \varepsilon_n < 0$. Допустим, что известна КФГ $G_{mb,mb}^m(\Omega) \equiv \gamma_m(\Omega)$ уравнения Шредингера (523) с потенциалом $\mathcal{U}_m(x)$. Перейдем к потенциалу $\mathcal{U}_{m+1}(x)$ и рассмотрим КФГ $G_{b(m+1),b(m+1)}^{m+1}(\Omega) \equiv \gamma_{m+1}(\Omega)$ уравнения (523), соответствующую потенциалу $\mathcal{U}_{m+1}(x)$. В этом разделе мы выразим КФГ $\gamma_{m+1}(\Omega)$ через $\gamma_m(\Omega)$, пользуясь тем, что при $x < mb$ оба этих потенциала совпадают.

Прежде всего отметим, что интересующий нас дискретный спектр оператора (523) с потенциалом (530) располагается на отрицательной полуоси. Поэтому всюду ниже мы считаем вещественную часть U энергетического аргумента функции Грина отрицательной

⁴²Потенциалы этого семейства нумеруются целым индексом m .

$\Omega = U - iV, U < 0$. Функция Грина $G_{x,bm}^m(\Omega)$ удовлетворяет следующим уравнениям (см. (526))

$$\begin{cases} [\Omega + d^2/dx^2 - \mathcal{U}_m(x)]G_{x,bm}^m(\Omega) = 0, & \text{при } x < bm \\ [\Omega + d^2/dx^2]G_{x,bm}^m(\Omega) = 0, & \text{при } x > bm \end{cases} \quad (531)$$

Введем функции $\Psi_{\pm}(x)$, такие что

$$[\Omega + d^2/dx^2 - \mathcal{U}_m(x)]\Psi_-(x) = 0, \text{ причем } \Psi_-(-\infty) = 0 \text{ и } \Psi_-(bm) = 1 \quad (532)$$

$$[\Omega + d^2/dx^2]\Psi_+(x) = 0, \text{ причем } \Psi_+(\infty) = 0 \text{ и } \Psi_+(bm) = 1 \quad (533)$$

Уравнения и условия (532, 533) однозначно определяют функции $\Psi_{\pm}(x)$, причем из (533) следует, что

$$\Psi_+(x) = e^{i\sqrt{\Omega}[x-bm]}, \quad \text{при } \Omega = U - iV, \quad V > 0, \quad U < 0 \quad (534)$$

Интересующая нас функция Грина может быть выражена через функции $\Psi_{\pm}(x)$ следующим образом

$$G_{x,bm}^m(\Omega) = \begin{cases} A\Psi_-(x), & \text{при } x < mb \\ B\Psi_+(x), & \text{при } x > mb \end{cases} \quad (535)$$

Условия непрерывности функции $G_{x,bm}^m(\Omega)$ при $x = mb$ и единичный скачок ее производной в этой точке ⁴³ приводят системе уравнений для определения констант A и B . Решая эту систему и принимая во внимание что $\Psi_{\pm}(mb) = 1$, получаем для КФГ $G_{bm,bm}^m(\Omega)$ следующее выражение

$$\gamma_m(\Omega) \equiv G_{bm,bm}^m(\Omega) = \frac{1}{\Psi'_+(bm) - \Psi'_-(bm)} \quad (536)$$

Заметим, что входящая в это выражение функция $\Psi_+(x)$ известна в явном виде (534).

Перейдем теперь от потенциала $\mathcal{U}_m(x)$ к потенциалу $\mathcal{U}_{m+1}(x)$ и рассмотрим функцию Грина $G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega)$. Она удовлетворяет уравнениям сходным с (531)

$$\begin{cases} [\Omega + d^2/dx^2 - \mathcal{U}_m(x)]G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = 0, & \text{при } x < bm \\ [\Omega + d^2/dx^2 - \eta]G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = 0, & \text{при } bm < x < b(m+1), \quad \eta \equiv u + \varepsilon_{m+1} \\ [\Omega + d^2/dx^2]G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = 0, & \text{при } x > b(m+1) \end{cases} \quad (537)$$

В полной аналогии с (535) для $G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega)$ можно написать следующие выражения

$$\begin{cases} G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = \tilde{A}\Psi_-(x), & \text{при } x < bm \\ G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = Ce^{i\sqrt{\Omega-\eta}x} + Fe^{-i\sqrt{\Omega-\eta}x}, & \text{при } bm < x < b(m+1) \\ G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = \tilde{B}\Psi_+(x), & \text{при } x > b(m+1) \end{cases} \quad (538)$$

⁴³Этот скачок приводит к появлению δ -функции в правой части (526)

В точке $x = mb$ функция Грина $G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega)$ должна быть непрерывна вместе с первой производной, а в точке $x = (m+1)b$ функция $G_{x,b(m+1)}^{m+1}(\Omega)$ должна быть непрерывна, а ее производная должна испытывать единичный скачок. Это дает четыре уравнения для определения констант \tilde{A}, C, F и \tilde{B} , входящих в (538). Интересующая нас КФГ $\gamma_{m+1}(\Omega)$, соответствующая потенциалу $\mathcal{U}_{m+1}(x)$, может быть выражена из формулы (538) следующим образом:

$$\gamma_{m+1}(\Omega) \equiv G_{b(m+1),b(m+1)}^{m+1}(\Omega) = \tilde{B}\Psi_+(b(m+1)) \quad (539)$$

Определяя константу \tilde{B} из упомянутой выше системы уравнений для \tilde{A}, C, F и \tilde{B} и пользуясь выражением (534) для функции $\Psi_+(x)$, можно получить для КФГ $\gamma_{m+1}(\Omega)$ следующее соотношение:

$$\frac{t\sqrt{\Omega-\eta}-\Psi'_-(mb)}{\sqrt{\Omega-\eta}+t\Psi'_-(mb)} = -i\sqrt{\frac{\Omega}{\Omega-\eta}} + \frac{1}{\gamma_{m+1}(\Omega)\sqrt{\Omega-\eta}} \quad \text{где } t \equiv \text{tg}[b\sqrt{\Omega-\eta}] \quad (540)$$

Используя формулу (536), выразим теперь $\Psi'_-(mb)$ через КФГ $\gamma_m(\Omega)$:

$$\Psi'_-(mb) = i\sqrt{\Omega} - \frac{1}{\gamma_m(\Omega)} \quad (541)$$

Здесь мы учли, что $\Psi'_+(bm) = i\sqrt{\Omega}$ при $U < 0$. С помощью соотношений (540) и (541) можно получить искомую связь КФГ $\gamma_{m+1}(\Omega)$ и КФГ $\gamma_m(\Omega)$ (соответствующее преобразование мы обозначим символом \mathcal{R}^{-1}):

$$\gamma_{m+1} = \frac{h + \gamma_m}{q + v\gamma_m} \equiv \mathcal{R}_{\Omega,\eta}^{-1}(\gamma_m) \quad (542)$$

где

$$h \equiv -\frac{t}{\sqrt{\Omega-\eta}+it\sqrt{\Omega}}, \quad q \equiv \frac{\sqrt{\Omega-\eta}-it\sqrt{\Omega}}{\sqrt{\Omega-\eta}+it\sqrt{\Omega}}, \quad v \equiv -\frac{t\eta}{\sqrt{\Omega-\eta}+it\sqrt{\Omega}}$$

$$t = \text{tg}[b\sqrt{\Omega-\eta}], \quad \Omega = U \pm iV, \quad U < 0, V = +0, \quad \eta \equiv u + \varepsilon_{m+1}$$

Ниже нам понадобится преобразование \mathcal{R} обратное (542), которое имеет следующий вид

$$\gamma_m = \frac{\gamma_{m+1}q - h}{1 - v\gamma_{m+1}} \equiv \mathcal{R}_{\Omega,\eta}(\gamma_{m+1}) \quad (543)$$

Таким образом, вся методика анализа совместной статистики краевых функций Грина, развитая для дискретных моделей в работах [41, 52] и изложенная 4 и 5 главах диссертации, может быть применена и в рассматриваемом случае непрерывной модели соответствующей уравнению Шредингера (523) с кусочно постоянным потенциалом (530). Соответствующие расчеты приводятся в следующих разделах.

0.8.4 Вычисление спектральной зависимости степени локализации $W(U)$

Совместная статистика функций Грина

Спектральная зависимость степени локализации $W(U)$ и плотность вероятности D обнаружить частицу на краю рассматриваемой случайной одномерной системы определяются соответственно формулами (529) и (528). Эти формулы полностью совпадают с формулами для аналогичных величин дискретной модели (см. Главу 4 и [41, 52]). По этой причине для реализации формул (529) и (528) можно использовать разработанную в предыдущих главах работы методику [41, 52], основанную на вычисление совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. Ниже мы кратко изложим эту методику, внося в нее необходимые для рассматриваемой задачи изменения.

Сделаем в интегралах, входящих в формулу (527), следующую замену переменных $\omega \equiv U_2 - U_1$, $U \equiv U_1$ и изменим обозначения $G_{rr} \rightarrow \gamma$. Тогда для величины D (528) можно написать следующее выражение:

$$D = \frac{1}{4\pi^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{V_{1,2} \rightarrow +0} \int d\omega dU e^{i\omega t} \langle \gamma(U - iV_1) \gamma(U + \omega + iV_2) \rangle \quad (544)$$

Если функция $\rho(x_1 y_1 x_2 y_2)$ – совместная статистика входящих в формулу (544) опережающей и запаздывающей функций Грина (здесь аргументы x_i и y_i , $i = 1, 2$ соответствуют вещественным и мнимым частям этих функций), то усредненное значение их произведения в формуле (544) может быть представлено в следующем виде

$$\begin{aligned} \langle \gamma(U - iV_1) \gamma(U + \omega + iV_2) \rangle &= \int dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 \rho(x_1 y_1 x_2 y_2) [x_1 x_2 - y_1 y_2 + i(x_1 y_2 + x_2 y_1)] \equiv (545) \\ &\equiv \langle x_1 x_2 \rangle - \langle y_1 y_2 \rangle + i \langle x_1 y_2 \rangle + i \langle y_1 x_2 \rangle, \end{aligned}$$

причем, как было показано в Главе 4 нашей работы, достаточно вычислить лишь вклад $i \langle x_1 y_2 \rangle$ и учетверить результат. Согласно [52] вычисление этого вклада при $V_{1,2} \rightarrow +0$ можно выполнить с помощью формулы:

$$\langle x_1 y_2 \rangle = \int d\varepsilon d\tilde{x}_1 d\tilde{x}_2 P(\varepsilon) \sigma_{U, U+\omega}(\tilde{x}_1 \tilde{x}_2) x_1(\tilde{x}_1) y_2(\tilde{x}_2), \quad (546)$$

причем вид преобразований $x_1(\tilde{x}_1)$ и $y_2(\tilde{x}_2)$ определяется дробно-линейной функцией $\mathcal{R}_{\Omega,\eta}^{-1}(x)$ (542)⁴⁴:

$$\mathcal{R}_{\Omega,\eta}^{-1}(x) = \frac{h+x}{q+vx} \equiv \frac{a_{\Omega,\eta} + b_{\Omega,\eta}x}{c_{\Omega,\eta} + g_{\Omega,\eta}x}, \quad \text{и таков} \quad (547)$$

$$x_1 = \text{Re} \left[\mathcal{R}_{\Omega_1,\eta}^{-1}(\tilde{x}_1) \right], \quad y_2 = \text{Im} \left[\mathcal{R}_{\Omega_2,\eta}^{-1}(\tilde{x}_2) \right], \quad \eta = u + \varepsilon, \quad \Omega_1 = U - iV_1, \quad \Omega_2 = U + \omega + iV_2 \quad (548)$$

Функция $\sigma_{U,U+\omega}(x_1x_2)$ в (546) представляет собой совместную статистику *вещественных* функций Грина, имеющих энергетические аргументы U и $U + \omega$ соответственно. В Главе 5 было показано (см. текст перед уравнением (450)), что эта функция удовлетворяет следующему уравнению

$$\sigma_{U_1U_2}(x_1x_2) = \int d\varepsilon P(\varepsilon) \sigma_{U_1U_2} \left[\mathcal{R}_{U_1\eta}(x_1), \mathcal{R}_{U_2\eta}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1\eta}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2\eta}(x_2)}{dx_2} \right|, \quad \eta = u + \varepsilon \quad (549)$$

причем в нашем случае преобразование $\mathcal{R}_{U,\eta}(x)$ определяется формулой (543). Расчеты, аналогичные приведенным в Главе 5 диссертации, показывают, что при $V_{1,2} \rightarrow +0$, соотношения (548) приводят к следующим выражениям для $y_2(\tilde{x}_2)$ и $x_1(\tilde{x}_1)$

$$y_2(\tilde{x}_2) \Big|_{V_2 \rightarrow +0} = \pi \frac{a_{U+\omega,\eta} g_{U+\omega,\eta} - b_{U+\omega,\eta} c_{U+\omega,\eta}}{g_{U+\omega,\eta}^2} \delta \left(\tilde{x}_2 + \frac{c_{U+\omega,\eta}}{g_{U+\omega,\eta}} \right), \quad (550)$$

$$x_1(\tilde{x}_1) \Big|_{V_1 \rightarrow +0} = \frac{a_{U,\eta} + b_{U,\eta}\tilde{x}}{c_{U,\eta} + g_{U,\eta}\tilde{x}} \quad (551)$$

Подстановка этих выражений в формулу (546) позволяет получить (с помощью расчета, аналогичного предшествующему формуле (461)) для интересующего нас среднего $\langle x_1y_2 \rangle$ следующее выражение

$$\langle x_1y_2 \rangle = \pi \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int \sigma_{UU+\omega}(x, a) x dx \quad (552)$$

Как и в аналогичных расчетах в Главы 5, при выводе этой формулы учитывается, что функция $\sigma_{U,U+\omega}(x_1x_2)$ удовлетворяет уравнению (549). Из приведенных формул следует, что интересующая нас величина D может быть представлена в виде, который теперь уже можно назвать стандартным:

$$D = \frac{i}{\pi^2} \lim_{V_{1,2} \rightarrow 0, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} \langle x_1y_2 \rangle d\omega dU = \frac{i}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} a^2 \sigma_{U,U+\omega}(x, a) x dx d\omega dU \quad (553)$$

⁴⁴Мы запишем эту функцию с использованием обозначений главы 5 диссертации (см. формулу (452)) и работы [52]

Как было показано ранее в Главе 4, функция участия $W(U)$ может быть получена из выражения (553), если в нем опустить интегрирование по U :

$$W(U) = \frac{i}{\pi} \lim_{a \rightarrow \infty, t \rightarrow \infty} \int e^{i\omega t} a^2 \sigma_{U, U+\omega}(x, a) x dx d\omega \quad (554)$$

Задача, таким образом, сводится решению уравнения (549). Предложенная в Главах 4 и 5 теория возмущений для решения уравнений вида (549), представляет собой разложение по степеням величины Δ (см. формулу (520)), причем первая ненулевая поправка имеет порядок Δ^2 . Как уже неоднократно указывалось (см. Главы 4, 5, 6), для вычисления величин D и $W(U)$ необходима только сингулярная по $\omega = U_2 - U_1$ часть решения уравнения для совместной статистики функций Грина (в нашем случае уравнения (549)), причем сингулярность имеет вид полюса. Таким образом, требуемая сингулярная часть (обозначим ее символом sing) может быть представлена в виде:

$$\text{sing } \sigma_{U\omega}(x_1 x_2) = \frac{\Delta^2}{\omega} \mathcal{F}_U(x_1 x_2) + O(\Delta^3) \quad (555)$$

Тогда с помощью формулы (554), для интересующей нас функции $W(U)$ и величины D получаем следующие формулы:

$$W(U) = -\Delta^2 \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int \mathcal{F}_U(x, a) x dx + O(\Delta^3), \quad D = \int W(U) dU \quad (556)$$

В следующем разделе будет описана теория возмущений для решения уравнения (549) и получено явное выражение для входящей в (555) функции $\mathcal{F}_U(x_1 x_2)$.

Теория возмущений для уравнения (549)

Для решения функциональных уравнений, возникающих в излагаемой ниже теории возмущения для совместной статистики [41, 52], необходимо найти собственные функции и собственные значения функционального оператора $\mathcal{H}_{\Omega, \eta}$, который определяется преобразованием $\mathcal{R}_{\Omega, \eta}$ (543) и действует на произвольную функцию $f(x)$ следующим образом ⁴⁵

$$\mathcal{H}_{\Omega, \eta} f(x) \equiv \frac{d\mathcal{R}_{\Omega, \eta}}{dx} f[\mathcal{R}_{\Omega, \eta}(x)] \quad (557)$$

⁴⁵Эта задача решена в Приложении 4 и ниже по ходу вычислений мы будем использовать полученные там результаты. Поэтому перед чтением дальнейшего материала желательно хотя бы поверхностно ознакомиться с Приложением 4.

Будем считать, что параметр Δ мал и представим искомую функцию $\sigma_{U_1 U_2}(x_1 x_2)$ в виде ряда по степеням Δ

$$\sigma_{U_1 U_2}(x_1 x_2) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x_1, x_2) \Delta^n \quad (558)$$

Разложим функцию $\sigma_{U_1 U_2}[\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1), \mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2)] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2)}{dx_2} \right|$, стоящую под знаком интеграла в правой части (549), в ряд по степеням ε . Тогда уравнение (549) дает

$$\sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x_1, x_2) \Delta^n = \quad (559)$$

$$\sum_{n, l=0}^{\infty} \frac{M_n \Delta^{n+l}}{n!} \frac{\partial^n}{\partial \varepsilon^n} \left\{ Q_l \left[\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1), \mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2)}{dx_2} \right| \right\}_{\varepsilon=0}$$

Напомним, что зависимость фигурирующих здесь величин от ε реализуется через величину $\eta = u + \varepsilon$. Приравнявая коэффициенты при равных степенях Δ в левой и правой частях (559), получаем рекуррентные соотношения для функций Q_n :

$$\Delta^0 : \quad Q_0(x_1 x_2) - Q_0 \left[\mathcal{R}_{U_1, u}(x_1), \mathcal{R}_{U_2, u}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1, u}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2, u}(x_2)}{dx_2} \right| = 0 \quad (560)$$

Равенство нулю первого момента функции $P(\varepsilon)$ (520) приводит к тому, что $Q_1(x_1 x_2) = 0$

$$\begin{aligned} \Delta^2 : \quad & Q_2(x_1 x_2) - Q_2 \left[\mathcal{R}_{U_1, u}(x_1), \mathcal{R}_{U_2, u}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1, u}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2, u}(x_2)}{dx_2} \right| = \quad (561) \\ & = \frac{M_2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left\{ Q_0 \left[\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1), \mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2) \right] \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_1, \eta}(x_1)}{dx_1} \right| \left| \frac{d\mathcal{R}_{U_2, \eta}(x_2)}{dx_2} \right| \right\}_{\varepsilon=0} \quad \eta = u + \varepsilon \quad \text{и т.д.} \end{aligned}$$

Из соотношений (560) и (561) видно, что в них фигурирует функциональный оператор $\mathcal{H}_{U_i, u}, i = 1, 2$ (557). Принимая во внимания его свойства, описанные в Приложении 4, можно сразу написать решение уравнения (560) для $Q_0(x_1 x_2)$:

$$Q_0(x_1 x_2) = \mathcal{L}_{U_1, u}(x_1) \mathcal{L}_{U_2, u}(x_2) \quad (562)$$

Для решения функционального уравнения (561) запишем искомую функцию $Q_2(x_1 x_2)$ в виде разложения по собственным функциям (595) оператора (557):

$$Q_2(x_1 x_2) = \sum_{|n|+|l| \neq 0} C_{nl} s_n^{U_1, u}(x_1) s_l^{U_2, u}(x_2) \quad (563)$$

Подставляя этот ряд в левую часть уравнения (561) и производя с помощью (594) разложение его правой части, получаем для коэффициентов C_{nl} , входящих в (563), следующие формулы:

$$C_{nl} = \frac{1}{1 - \lambda_n(U_1, u) \lambda_l(U_2, u)} \frac{M_2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \left[J_n(U_1 \varepsilon) J_l(U_2 \varepsilon) \right]_{\varepsilon=0} \quad (564)$$

где величины $J_n(U, \varepsilon)$ определяются как

$$J_n(U, \varepsilon) \equiv \int \frac{\mathcal{L}_{U,u}(\mathcal{R}_{U,\eta}(x)) \mathcal{R}'_{U,\eta}(x)}{\mathcal{G}_{U,u}^n(x)} dx = \int \frac{\mathcal{L}_{U,u}(z)}{\mathcal{G}_{U,u}^n(\mathcal{R}_{U,\eta}^{-1}(z))} dz = J_{-n}^*(U, \varepsilon), \quad \eta = u + \varepsilon \quad (565)$$

Определения входящих в эти выражения функций \mathcal{L} и \mathcal{G} приведены в Приложении 4. При разложении правой части (561) мы использовали выражение (562) для функции $Q_0(x_1 x_2)$. Как было сказано выше, нас интересует только сингулярная по $\omega = U_2 - U_1$ часть $Q_2(x_1 x_2)$. Для выделения этой части в формуле (563) следует сохранить только слагаемые с $n = -l$ (см. Главы 4 и 5), поскольку только для этих слагаемых знаменатель $1 - \lambda_n(U_1, u) \lambda_l(U_2, u)$ в выражениях (564) обращается в нуль при $\omega = U_2 - U_1 = 0$. Расчет, полностью аналогичный выполненному в Главе 5 [41], приводит к следующему выражению для входящей в формулу (556) функции $\mathcal{F}_U(x_1 x_2)$:

$$\mathcal{F}_U(x_1 x_2) = -\frac{iM_2}{2b} \sqrt{U-u} \sum_{n \neq 0} \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} \Big|_{\varepsilon=0} J_n(U, \varepsilon) \Big|^2 \frac{s_n^{U,u}(x_1) s_{-n}^{U,u}(x_2)}{n} \quad (566)$$

Приведем теперь явные выражения для интегралов (565):

$$J_0(U, \varepsilon) = 1, \quad J_n(U, \varepsilon) = \mathcal{G}_{U,u}^{-n}(\mathcal{R}_{U,\eta}^{-1}(\bar{r})) \Big|_{\eta=u+\varepsilon} = [J_1(U, \varepsilon)]^n, \quad n > 0, \quad \bar{r} = \frac{\sqrt{U} - \sqrt{U-u}}{iu} \quad (567)$$

Эти выражения получаются интегрированием (565) по вычетам, причем для вычисления входящих в (564) производных, величину ε можно считать настолько малой, что расположение полюсов подынтегральных выражений по отношению к вещественной оси⁴⁶ от нее не зависит. Пользуясь (596) можно получить следующее соотношение

$$\frac{1}{\mathcal{G}_{U,u}^n(\mathcal{R}_{U,u}^{-1}(z))} = \lambda_n(U) \frac{1}{\mathcal{G}_{U,u}^n(z)} = \lambda_n(U, u) \left(\frac{r-z}{r^*-z} \right)^n \quad (568)$$

из которого следует, что $J_n(U, 0) = 0$ при $n \neq 0$ и что в общем случае разложение $\mathcal{G}_{U,u}^{-1}(\mathcal{R}_{U,\eta}^{-1}(\bar{r}))$ по степеням ε начинается с первой степени ε и может быть записано в следующем виде:

$$\mathcal{G}_{U,u}^{-1}(\mathcal{R}_{U,\eta}^{-1}(\bar{r})) \Big|_{\eta=u+\varepsilon} = J_1(U, \varepsilon) = K_U \varepsilon + O(\varepsilon^2) \quad (569)$$

Подстановка этого выражения в формулу (566) показывает, что в сумме (566) остаются только слагаемые, содержащие $J_{\pm 1}(U, \varepsilon)$, для которых вторая производная их квадрата модуля отлична от нуля при $\varepsilon = 0$. Таким образом, выражение (566) для функции $\mathcal{F}_U(x_1 x_2)$ может быть преобразовано к виду:

$$\mathcal{F}_U(x_1 x_2) = -\frac{iM_2}{b} \sqrt{U-u} |K_U|^2 \left[s_1^{U,u}(x_1) s_{-1}^{U,u}(x_2) - s_{-1}^{U,u}(x_1) s_1^{U,u}(x_2) \right] \quad (570)$$

⁴⁶Выше или ниже вещественной оси

Прямое алгебраическое вычисление, использующее явные выражения (594) для функции $\mathcal{G}_{U,u}(x)$ и (542) для преобразования $\mathcal{R}_{U,\eta}^{-1}(x)$, показывает что

$$K_U = ie^{ib\sqrt{U-u}} \frac{[\sqrt{U} - \sqrt{U-u}]^2}{2u(U-u)} \sin[b\sqrt{U-u}], \quad |K_U|^2 = \frac{\sin^2[b\sqrt{U-u}]}{4(U-u)^2} \quad (571)$$

Здесь мы воспользовались тем, что в нашем случае $U < 0$ и, следовательно $|U|+U = 0$. Наконец, используя приведенные в [41] (см. Главу 4) выражения для моментов и предельных значений функций $\sigma_U^n(x)$ (см. Приложение 4), с помощью формул (593) можно получить следующие выражения для первых моментов и предельных значений s -функций:

$$\int s_n^{U,u}(x) x dx = i \frac{n}{|n|} \frac{\sqrt{U-u}}{u} \frac{|t|}{t} \quad \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 s_n^{U,u}(a) = \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{U-u}}{u} \frac{|t|}{t} \quad (572)$$

После этого с помощью формулы (556) получаем для функции участия $W(U)$ и величины D выражения (521) и (522).

0.8.5 Численный эксперимент. Длина локализации.

Как уже отмечалось, в настоящее время наиболее убедительным способом проверки теоретических результатов, относящихся к одномерным твердотельным разупорядоченным моделям, является сравнение с *численным экспериментом*. Ниже представлены результаты численной проверки выражения (521) для функции участия $W(U)$ (спектральной зависимости степени локализации), являющегося главным результатом данной главы диссертационной работы. При проверке мы использовали определение (529), причем $dU \ll |u|$. Фигурирующие в (529) волновые функции были получены численным решением краевой задачи для уравнения Шредингера (523) со случайным потенциалом (530) методом матриц переноса. При расчетах мы полагали $p(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon + 1/2) - \Theta(\varepsilon - 1/2)$ (см. формулу (520)) и число участков постоянного потенциала $N \sim 200 - 900$. Окончательная функция участия $W(U)$ получалась усреднением по $N_r \sim 2000 - 4000$ реализациям случайного потенциала.

При проведении описанных выше расчетов необходимо иметь ввиду следующее: 1) поскольку полученная в данной работе формула (521) справедлива в термодинамическом пределе, число N должно быть достаточно большим. Однако, при $N > 800 - 900$ быстро нарастают ошибки при вычислении волновых функций, связанные с перемножением

большого количества матриц переноса, 2) при заданной длине bN случайной системы, степень разупорядочения Δ должна быть достаточно *большой*, чтобы длина локализации волновых функций не превосходила bN и достаточно *малой*, чтобы не выйти за область применимости формулы (521), 3) при расчетах необходимо проверять квадратичный характер зависимости получаемой численно функции $W(U) \sim \Delta^2$ и независимость результатов от N . Результаты численных расчетов для различных значений параметров b и Δ представлены на рис.27 (значения всех параметров приведены на рисунке), причем гладкие кривые рассчитаны по формуле (521) без какой-либо подгонки. Рис.27b демонстрирует лучшее согласие теории и численного эксперимента, чем рис.27a, поскольку при получении численной зависимости для рис.27b описанные выше условия выполнялись существенно лучше.

При численных расчетах полезно иметь возможность оценивать длину локализации l состояний случайной системы с заданной энергией U . Для таких оценок можно использовать полученную в настоящей главе диссертации функцию участия $W(U)$ (формула (521)). Рассмотрим состояния случайной системы с энергиями, попадающими в интервал $[U, U + dU]$. Число таких состояний будет $\rho(U)dU$, где $\rho(U)$ – плотность состояний. В силу пространственной однородности статистических свойств случайного потенциала $\mathcal{U}(x)$ можно сказать, что "центры тяжести" этих локализованных состояний более или менее однородно распределены вдоль оси x . Следовательно, количество состояний в *энергетическом* интервале $[U, U + dU]$, "центры тяжести" которых попадают в *пространственный* интервал dL оси x , можно оценить как $[\rho(U)/L]dUdL$, где $L = Nb$ – длина потенциального ящика с флуктуирующим дном. Заметим теперь, что в функцию участия (529) основной вклад дают те состояния, "центры тяжести" которых удалены от края ⁴⁷ потенциального ящика не более чем на длину l локализации этих состояний. Число dn таких состояний оценивается как $dn = [\rho(U)/L]ldU$. Если обозначить $\psi_U(0)$ среднюю амплитуду волновых функций этих состояний при $x = 0$, то для функции участия (529) можно написать следующее оценочное выражение

$$W(U)dU = |\psi_U(0)|^4 dn \quad W(U) = \frac{\rho(U)l}{L} |\psi_U(0)|^4 \quad (573)$$

⁴⁷ Нам будет удобно сейчас считать координату края ящика нулевой $x = 0$, а сам ящик расположенным на положительной полуоси.

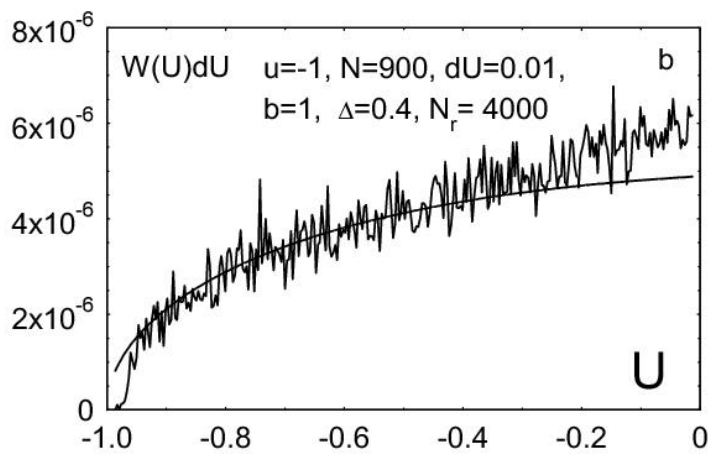
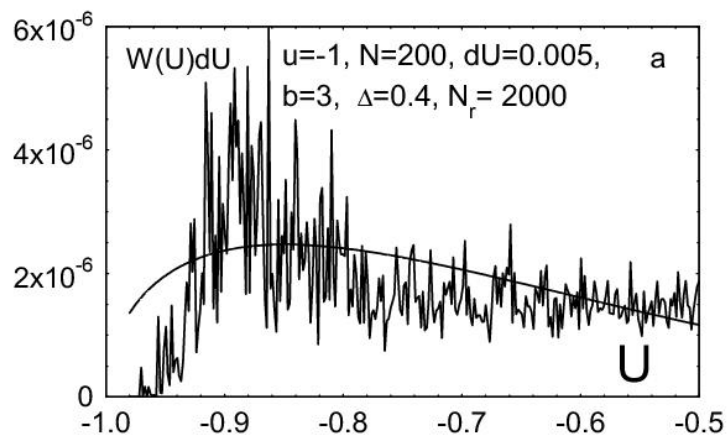


Рис. 27: Распределение степени локализации состояний в одномерных разупорядоченной системы с кусочно постоянным случайным потенциалом. Зашумленные зависимости получены компьютерным моделированием, гладкие кривые – при помощи формулы (521).

С приемлемой для наших целей точностью можно считать, что входящая в эту формулу плотность состояний $\rho(U)$ слабо отличается от плотности состояний $\rho_0(U)$ в потенциальном ящике *без беспорядка*, длина которого L а глубина u :

$$\rho(U) \approx \rho_0(U) = \frac{L}{2\pi\sqrt{U-u}} \quad (574)$$

Тогда формула (573) дает

$$W(U) = \frac{l |\psi_U(0)|^4}{2\pi\sqrt{U-u}} \quad (575)$$

Входящие в эту формулу длину локализации l и модуль волновой функции $|\psi_U(0)|$ можно связать условием нормировки, которое даст второе соотношение для их вычисления. Если величина $\psi_U(0)$ представляла бы собой *типичную* амплитуду волновой функции, то указанная связь имела бы простой вид $|\psi_U(0)|^2 l = 1$. Однако приводимые ниже аргументы показывают, что амплитуда волновой функции в точке $x = 0$ может быть значительно меньше ее типичной амплитуды, которую мы обозначим $\bar{\psi}_U$. Оценим $\bar{\psi}_U$ из следующих соображений. При $x < 0$ (т.е. вне потенциального ящика) волновая функция имеет вид $\psi_U(x) = \psi_U(0) \exp[\sqrt{-U}x]$. При $0 < x < l$ рассеяние в случайном потенциале выражено слабо и волновая функция на этом интервале приблизительно соответствует свободному движению частицы с энергией U . Поэтому для волновой функции вблизи края разупорядоченной системы можно написать следующие выражения:

$$\begin{cases} \psi_U(x) = \psi_U(0) \exp[x\sqrt{-U}] & x < 0 \\ \psi_U(x) = A \sin[x\sqrt{U-u} + \varphi] & 0 < x < l \end{cases} \quad (576)$$

Мы считаем здесь, что величина энергии U достаточно велика и движение частицы имеет баллистический, а не туннельный характер, т.е. $U - u - \varepsilon_i > 0$. В рассматриваемом случае малого беспорядка, когда $U - u - \varepsilon_i \approx U - u$, это требование не сильно ограничивает наше рассмотрение. Условия непрерывности волновой функции и ее первой производной при $x = 0$ позволяют определить константы A и φ :

$$\begin{cases} \psi_U(0) = A \sin \varphi \\ \psi_U(0)\sqrt{-U} = A\sqrt{U-u} \cos \varphi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A^2 = |\psi_U(0)|^2 \frac{u}{u-U} \\ \operatorname{tg} \varphi = \sqrt{\frac{u-U}{U}} \end{cases} \quad (577)$$

Интересующее нас типичное значение квадрата модуля волновой функции в области локализации l можно оценить как половину его максимального значения на промежутке $[0, l]$:

$$|\bar{\psi}_U|^2 = \frac{A^2}{2} \max_{x \in [0, l]} \sin^2[x\sqrt{U-u} + \varphi] \quad (578)$$

Используя формулы (577), можно получить для $|\bar{\psi}_U|^2$ следующие выражения:

$$|\bar{\psi}_U|^2 = \frac{|\psi_U(0)|^2}{2} \frac{u}{u-U} \quad \text{при} \quad l\sqrt{U-u} + \varphi > \frac{\pi}{2} \quad (579)$$

$$|\bar{\psi}_U|^2 = \frac{|\psi_U(0)|^2}{2} \frac{u}{u-U} \sin^2[l\sqrt{U-u} + \varphi] \quad \text{при} \quad l\sqrt{U-u} + \varphi < \frac{\pi}{2}$$

Теперь можно применить упомянутое выше условие нормировки $|\bar{\psi}_U|^2 l = 1$:

$$\frac{|\psi_U(0)|^2}{2} \frac{l}{u-U} = 1 \quad \text{при} \quad l\sqrt{U-u} + \varphi > \frac{\pi}{2} \quad (580)$$

$$\frac{|\psi_U(0)|^2}{2} \frac{l}{u-U} \sin^2[l\sqrt{U-u} + \varphi] = 1 \quad \text{при} \quad l\sqrt{U-u} + \varphi < \frac{\pi}{2} \quad (581)$$

Соотношения (580), (581) и (575) позволяют выразить длину локализации l через полученную в данной работе функцию участия $W(U)$. Например, (580) и (575) дают следующее выражение для длины локализации:

$$l = \frac{2|U-u|^{3/2}}{\pi W(U)u^2} \equiv l_0(U) \quad (582)$$

Для алгебраической связности, мы сохраняем здесь численный множитель $2/\pi$. Эта формула применима, если полученная с ее помощью длина локализации l удовлетворяет условию применимости (580): $l\sqrt{U-u} + \varphi > \frac{\pi}{2}$. Комбинируя формулы (581) и (575) получаем уравнение для определения длины локализации в случае когда $l\sqrt{U-u} + \varphi < \frac{\pi}{2}$:

$$\frac{l_0(U)}{l} = \sin^4 \left[l\sqrt{U-u} + \arctg \sqrt{\frac{u-U}{U}} \right] \quad (583)$$

В актуальном случае когда $U-u > \Delta$ основной оказывается формула (582), поэтому мы не будем заниматься анализом трансцендентного уравнения (583). На рис.28 показан типичный вид волновых функций рассматриваемой случайной системы при различных энергиях. Горизонтальными жирными линиями показаны длины локализации, полученные при помощи формул (582) и (521). Из рис.28 видно, что эти формулы могут служить для удовлетворительной оценки спектральной зависимости длины локализации состояний описанной в данной главе диссертационной работы непрерывной модели разупорядоченной системы.

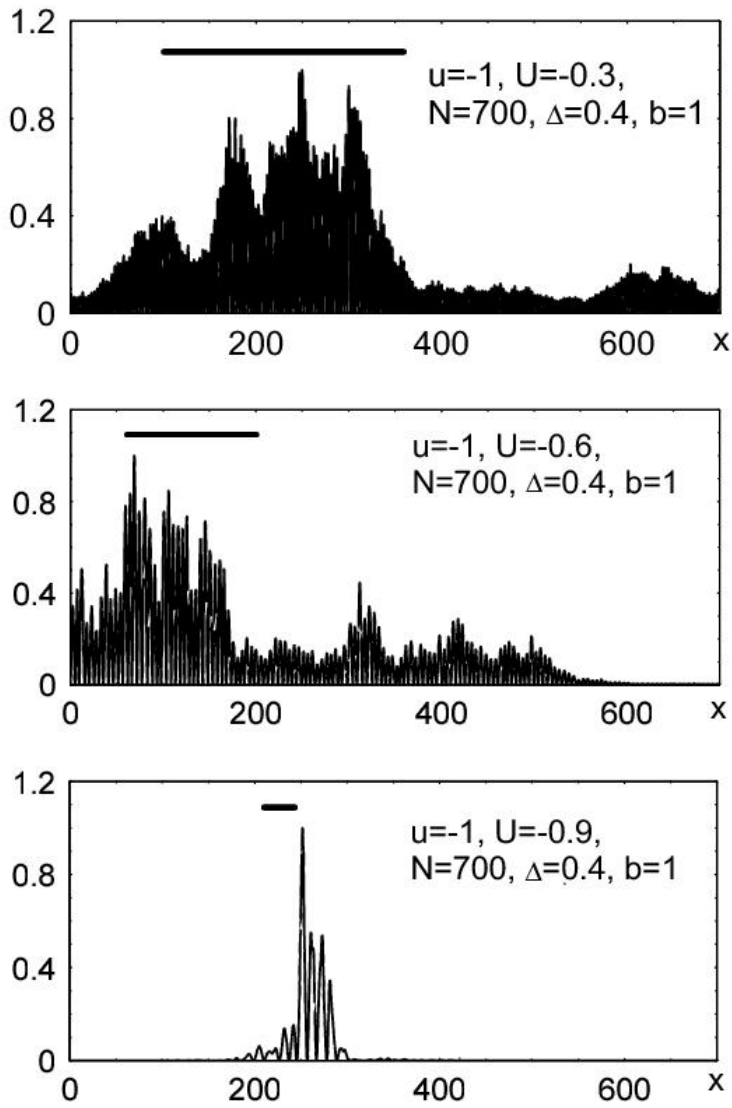


Рис. 28: Волновые функции одномерной разупорядоченной системы с кусочно постоянным случайным потенциалом при различных энергиях U . Жирными горизонтальными линиями показана длина локализации, рассчитанная по формуле (582).

0.8.6 Заключение

В настоящей главе диссертационной работы теория возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, разработанная в предыдущих главах диссертации для дискретных случайных одномерных моделей, применена для анализа непрерывной разупорядоченной модели, описываемой уравнением Шредингера с кусочно постоянным случайным потенциалом. С помощью развитых представлений получено выражение для спектральной зависимости степени локализации в смысле критерия Андерсона. Приводятся результаты численной проверки полученных результатов. В соответствии с общепринятыми представлениями[19], состояния с отрицательными энергиями рассматриваемой случайной системы оказываются, вообще говоря, локализованными, поскольку функция участия (521) при этих энергиях оказывается отличной от нуля. Исключениями являются точки делокализации, появляющиеся при $b\sqrt{-u} > \pi$ (см. формулу (521)). К сожалению, нам не удалось численно исследовать поведение функции участия $W(U)$ при больших значениях параметра b (когда появляются указанные точки), поскольку применяемый алгоритм численного решения уравнения Шредингера оказывался неустойчивым. В связи с этим уместно обратить внимание на сходство описанной в данной главе работы непрерывной модели с дискретной моделью со сложной структурной единицей, исследованной в Главе 5. Есть все основания полагать, что поведение функции участия $W(U)$ рассматриваемой здесь непрерывной модели качественно совпадает с таковым для дискретной модели со сложной структурной единицей, для которой оказывается возможным численный анализ. Еще раз обратим внимание на то, что развитые в этой главе работы представления и полученные результаты могут оказаться полезными при анализе распространения электромагнитных волн в структурах типа одномерных фотонных кристаллов при наличии беспорядка. Результаты этой главы диссертационной работы опубликованы в [61]

0.8.7 Приложение 4. Решение спектральной задачи для оператора $\mathcal{H}_{\Omega,\eta}$

Для решения этой задачи мы используем систему собственных функций $\sigma_C^n(x)$ оператора $H_C f(x) \equiv f(C - 1/x)/x^2$, полученную в Приложениях 1 и 2 в явном виде.⁴⁸ Рассмотрим какую-либо из этих собственных функций $\sigma(x)$ и обозначим через λ соответствующее ей собственное число оператора H_C . Тогда должно выполняться следующее соотношение:

$$\frac{1}{x^2} \sigma(C - 1/x) = \lambda \sigma(x) \quad (584)$$

Перейдем в этом уравнении к новой переменной y , связанной с переменной x следующим образом $x = A + By$, $y = [x - A]/B$, где параметры A и B пока оставим неопределенными. Определим функцию $\Phi(y)$ как $\Phi(y) \equiv C - 1/x = C - 1/[A + By]$. Тогда нетрудно убедиться в том, что переход к переменной y в уравнении (584) приводит к следующему соотношению

$$\frac{1}{B} \frac{d\Phi}{dy} \sigma[\Phi(y)] = \lambda \sigma(A + By) \quad (585)$$

Введем теперь следующую функцию $s(y)$

$$s(y) \equiv B \sigma(A + By) \text{ и, следовательно, } \sigma(z) = \frac{1}{B} s\left(\frac{z - A}{B}\right) \quad (586)$$

Из (585) вытекает, что

$$\frac{1}{B} \frac{d\Phi}{dy} s\left(\frac{\Phi(y) - A}{B}\right) = \lambda s(y) \quad (587)$$

Если определить функцию \mathcal{R} следующим соотношением

$$\mathcal{R}(y) \equiv \frac{\Phi(y) - A}{B} = \left[\frac{(C - A)A - 1}{AB} + \frac{C - A}{A} y \right] / \left[1 + \frac{B}{A} y \right], \quad (588)$$

то уравнение (587) можно переписать в виде

$$\frac{d\mathcal{R}}{dy} s[\mathcal{R}(y)] = \lambda s(y) \quad (589)$$

Теперь выберем параметры A , B и C так, чтобы преобразование, определяемое формулой (588), совпадало бы с (543). Это приводит к системе уравнений на указанные параметры,

⁴⁸Напомним, что C является параметром оператора H_C , а целочисленный индекс $n = \dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots$ нумерует собственные числа и собственные функции этого оператора. В интересующем нас случае $|C| < 2$. Это соответствует области странного аттрактора для оператора H_C .

решение которой позволяет определить их явный вид:

$$A = \frac{\sqrt{\Omega - \eta} + it\sqrt{\Omega}}{\sqrt{(\Omega - \eta)(1 + t^2)}} \quad B = \frac{t\eta}{\sqrt{(\Omega - \eta)(1 + t^2)}} \quad C = \frac{2}{\sqrt{1 + t^2}}, \quad t = \operatorname{tg}\left[b\sqrt{\Omega - \eta}\right] \quad (590)$$

Таким образом, функция $s(y)$ (586), построенная с помощью собственной функции $\sigma(x)$ оператора H_C , при значениях параметров A , B и C определяемых из формул (590), является собственной функцией оператора $\mathcal{H}_{\Omega, \eta}$ (557), причем соответствующее собственное число λ совпадает с таковым для оператора H_C . Ниже мы приведем компактные выражения для s -функций.

Как показано в Приложении 2, произвольная функция $f(x)$ может быть разложена в ряд по функциям $\sigma_C^n(x)$. Напомним явный вид функций $\sigma_C^n(x)$ и выражения для собственных чисел λ_n оператора H_C при $|C| < 2$:

$$\sigma_C^n(x) = L_C(x)G^n(x), \quad \text{где } L_C(x) \equiv \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - R} - \frac{1}{x - R^*} \right], \quad G(x) \equiv \left[\frac{R^* - x}{R - x} \right] \quad (591)$$

$$\lambda_n = \left(\frac{C + i\sqrt{4 - C^2}}{C - i\sqrt{4 - C^2}} \right)^n \quad R \equiv \frac{C + i\sqrt{4 - C^2}}{2} \quad R^* \equiv \frac{C - i\sqrt{4 - C^2}}{2} \quad |C| < 2$$

и правила разложения произвольной функции $f(x)$ в ряд по указанным функциям

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} K_n \sigma_C^n(x), \quad K_n = \int \frac{f(x)}{G^n(x)} dx \quad (592)$$

С помощью этих соотношений можно получить аналогичные правила для собственных функций (586) оператора (557) (назовем их s -функциями)

$$\mathcal{H}_{\Omega, \eta} s_n^{\Omega, \eta}(y) = \lambda_n(\Omega, \eta) s_n^{\Omega, \eta}(y), \quad s_n^{\Omega, \eta}(y) = B \sigma_C^n(A + By), \quad \lambda_n(\Omega, \eta) = \exp[2inb\sqrt{\Omega - \eta}] \quad (593)$$

Здесь параметры A , B и C определяются формулами (590). Верхний индекс у s -функций показывает их зависимость от энергетического аргумента Ω . Произвольная функция $f(y)$ может быть представлена рядом

$$f(y) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \mathcal{K}_n s_n(y), \quad \mathcal{K}_n = \int \frac{f(y)}{G^n(A + By)} dy \equiv \int \frac{f(y)}{\mathcal{G}_{\Omega, \eta}^n(y)} dy, \quad (594)$$

где

$$\mathcal{G}_{\Omega, \eta}(y) \equiv \frac{r^* - y}{r - y}, \quad \text{где } r \equiv \frac{\sqrt{\Omega} - \sqrt{\Omega - \eta}}{i\eta} \quad r^* \equiv \frac{\sqrt{\Omega} + \sqrt{\Omega - \eta}}{i\eta}$$

С помощью введенных таким образом величин для функций $s_n^{\Omega,\eta}(y)$ можно написать следующие компактные выражения:

$$s_n^{\Omega,\eta}(y) = \mathcal{L}_{\Omega,\eta}(y)\mathcal{G}_{\Omega,\eta}^n(y), \quad \mathcal{L}_{\Omega,\eta}(y) \equiv \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{y-r} - \frac{1}{y-r^*} \right] \quad (595)$$

Здесь нижние индексы у лорентциана \mathcal{L} показывают зависимость этой функции от энергетических параметров Ω и $\eta = u + \varepsilon$. Нетрудно убедиться в том, что

$$\mathcal{G}_{\Omega,\eta}^n(\mathcal{R}_{\Omega,\eta}(x)) = \lambda_n(\Omega, \eta)\mathcal{G}_{\Omega,\eta}^n(x) \quad (596)$$

0.9 ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КРИТЕРИЯ ЛОКАЛИЗАЦИИ АНДЕРСОНА В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ПРИ КОРРЕЛИРОВАННОМ ДИАГОНАЛЬНОМ БЕСПОРЯДКЕ.

0.9.1 Введение, постановка задачи и основные результаты.

В предшествующих главах диссертации, посвященным низкоразмерным разупорядоченным системам, мы рассматривали *некоррелированный* (δ -коррелированный) диагональный беспорядок, при котором энергии узлов представляют собой *независимые* случайные величины с заданной статистикой. Исключением можно считать Главу 5, где была проанализирована случайная цепочка со сложной структурной единицей, которая может (правда, довольно искусственно) рассматриваться как коррелированная с характерной длиной корреляции m . Понятно, что модели случайных систем, в которых беспорядок представлен некоторым δ -коррелированным случайным процессом [19], являются простейшими и следующим возможным шагом на пути усложнения таких моделей является учет корреляций. Вопрос о влиянии корреляций является тем более актуальным, что в реальных системах следует ожидать коррелированного беспорядка. К тому же, как показано в [73, 74, 55], важнейшее свойство случайных систем – локализация собственных состояний – может существенно зависеть от наличия корреляций.

В настоящей главе диссертационной работы для простейшей диагонально разупорядоченной *коррелированной* одномерной цепочки выполнен расчет спектральной зависимости степени локализации в смысле критерия Андерсона и продемонстрировано существенное отличие указанной зависимости от случая некоррелированной цепочки. Для расчета используется предложенный в диссертации метод [41, 52, 56], основанный на построении совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. В приводимом ниже расчете параметром малости является обратный радиус корреляции, и полученные формулы работают при значительном (по отношению к невозмущенному гамильтониану) уровне разупорядочения, когда обычная квантовомеханическая теория возмущений

неприменима. Поэтому приведенные вычисления еще раз демонстрируют эффективность и универсальность предложенного в диссертации метода совместной статистики функций Грина, позволяющего проанализировать целый ряд задач, некоторые из которых являются квантовомеханически непертурбативными.⁴⁹

Перейдем к количественной постановке задачи. Матрица гамильтониана разупорядоченной модели, которую мы предполагаем исследовать, имеет знакомый вид

$$H_{n,n'} = \delta_{n,n'}\varepsilon_n + \delta_{n,n'+1} + \delta_{n,n'-1}, \quad n, n' = 1, \dots, N \quad (597)$$

однако, в отличие от традиционной постановки задачи, узельные энергии ε_n образуют теперь коррелированную последовательность со следующим простейшим механизмом корреляции, который мы уже использовали в третьей главе диссертации при получении точного решения для коррелированной модели Ллойда (см. формулу (275) и ниже). Сопоставим каждому узлу n нашей решетки некоторую вспомогательную случайную величину ξ_n , причем величины ξ_n будем считать взаимно независимыми и имеющими заданную функцию распределения $P(\xi)$. С помощью этих величин построим узельные энергии ε_n следующим образом:

$$\varepsilon_n = (1 - e^{-\alpha}) \sum_{m \leq n} e^{\alpha(m-n)} \xi_m, \quad \alpha > 0 \quad (598)$$

При таком построении ε_n будут коррелированы, причем соответствующая корреляционная функция имеет экспоненциальный вид

$$\langle \varepsilon_n \varepsilon_{n'} \rangle = \langle \xi^2 \rangle \left(\frac{1 - e^{-\alpha}}{1 + e^{-\alpha}} \right) e^{-\alpha|n-n'|} = \langle \xi^2 \rangle \left(\frac{1 - \beta}{1 + \beta} \right) \beta^{|n-n'|}, \quad \beta \equiv e^{-\alpha}, \quad \beta \in [0, 1] \quad (599)$$

с характерным радиусом корреляции $R = 1/\alpha$. Обратим внимание на то, что последовательность ε_n причинно коррелирована, т.е. ε_n зависит только от тех ξ_m , у которых $m \leq n$.

Для дальнейшего существенно следующее проверяемое прямым расчетом соотношение:

$$\varepsilon_{n+1} = \beta \varepsilon_n + (1 - \beta) \xi_{n+1} \quad (600)$$

Ниже мы будем считать функцию распределения вспомогательных независимых величин ξ_n гауссовой

$$P(\xi) = \frac{1}{\Delta} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(\xi/\Delta)^2}. \quad (601)$$

⁴⁹Таковыми являются рассмотренная в Главе 6 задача Ллойда или рассмотренная в Главе 4 задача о бинарно разупорядоченной цепочке при произвольной энергии дефекта.

Нетрудно убедиться в том, что в этом случае функция распределения $\mathcal{P}(z)$ узельных энергий ε_n также будет иметь гауссовский вид:

$$\mathcal{P}(z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\bar{\Delta}} e^{-(z/\bar{\Delta})^2} \quad \text{где } \bar{\Delta} \equiv \Delta \sqrt{\frac{1-\beta}{1+\beta}} \quad (602)$$

Для такой цепочки с коррелированным диагональным беспорядком рассмотрим стандартную для нашей диссертационной работы задачу о вычислении критерия Андерсона D и спектральной зависимости степени локализации $W(U)$ ⁵⁰. Как уже неоднократно говорилось в предыдущих главах диссертации, указанные величины выражаются через собственные векторы и собственные числа Ψ^λ и E_λ матрицы (597) следующим образом:

$$D = \int W(U) dU, \quad \text{где } W(U) dU = \left\langle \sum_{E_\lambda \in [U, U+dU]} \left| \Psi_N^\lambda \right|^4 \right\rangle \quad (603)$$

В соответствии с методикой, предложенной в данной диссертационной работе, для решения поставленной таким образом задачи необходимо знать совместную статистику двух краевых функций Грина (КФГ) при разных (комплексных) энергиях $g_N(\Omega_1)$ и $g_N(\Omega_2)$, где $\Omega_1 = U_1 + iV_1$ и $\Omega_2 = U_2 - iV_2$, причем $V_{1,2} > 0$. Методика вычисления критерия Андерсона D и функции $W(U)$ с помощью этой статистики описана в Главах 4, 5, 6 и 7. Ниже будут получены соответствующие формулы, учитывающие коррелированный характер узельных энергий. Сразу отметим, что, в отличие от задач проанализированных в предыдущих главах, в рассматриваемом случае коррелированного беспорядка получение замкнутого уравнения окажется возможным только на совместную статистику двух краевых функций Грина ($g_N(\Omega_{1,2})$) и энергии краевого узла ε_N . Указанная статистика представляет собой функцию двух комплексных и одного вещественного аргументов $\rho(z_1 z_2, \varepsilon)$ и определяется так, что величина $\rho(x_1 + iy_1, x_2 + iy_2, \varepsilon) dx_1 dy_1 dx_2 dy_2 d\varepsilon$ равна вероятности того, что $\text{Re } g_N(\Omega_1) \in [x_1, x_1 + dx_1]$ и $\text{Im } g_N(\Omega_1) \in [y_1, y_1 + dy_1]$ и $\text{Re } g_N(\Omega_2) \in [x_2, x_2 + dx_2]$ и $\text{Im } g_N(\Omega_2) \in [y_2, y_2 + dy_2]$ и $\varepsilon_N \in [\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. Нашей первой задачей будет получение замкнутого уравнения на эту функцию. Для этого мы, как и в Главах 4, 5 и 6, используем известное соотношение (60), позволяющее выразить КФГ цепочки с одним добавленным узлом $g_{N+1}(\Omega)$ через КФГ $g_N(\Omega)$ исходной цепочки:

$$g_{N+1}(\Omega) = \frac{1}{\Omega - \varepsilon_{N+1} - g_N(\Omega)} \quad (604)$$

⁵⁰Выше функция $W(U)$ называлась также функцией участия, поскольку $W(U)$ имеет много общего с inverse participation ratio (IPR).

Для компактификации расчетов нам ниже будет удобно использовать следующее определение δ -функции, аргументом которой является аналитическая функция комплексной переменной $F(z) = u(x, y) + iv(x, y), z = x + iy$:

$$\delta[F(z)] \equiv \delta[u(x, y)]\delta[v(x, y)] \quad (605)$$

Такая δ -функция всегда вещественна и может быть преобразована следующим образом. Пусть $z_0 = x_0 + iy_0$ есть корень функции $F(z)$, т.е. $F(z_0) = 0$. Тогда прямой расчет с использованием соотношений Коши-Римана для функции $F(z)$, показывает, что

$$\delta[F(z)] = \frac{\delta[z - z_0]}{|F'(z_0)|^2}, \quad F(z_0) = 0 \quad (606)$$

причем стоящая в числителе δ -функция комплексной функции $z - z_0$ понимается в смысле (605).

Также для компактификации расчетов мы обозначим символом $\int_R dz$ следующие интегралы от функций (необязательно аналитических) $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ комплексной переменной $z = x + iy$:

$$\int_R f(z)dz \equiv \int \int_{-\infty}^{+\infty} [u(x, y) + iv(x, y)]dxdy \quad (607)$$

Вернемся теперь к задаче получения уравнения на совместную статистику $\rho(z_1, z_2, \varepsilon)$ и добавим к нашей цепочке из N узлов еще один узел $N + 1$. Если обозначить через $\tilde{\rho}(z_1, z_2, \varepsilon)$ функцию, аналогичную ρ , только описывающую совместную статистику КФГ цепочки с добавленным узлом, то с учетом приведенных определений и соотношения (600), для нее можно написать следующее выражение:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(z_1, z_2, \varepsilon) &= \left\langle \delta\left(z_1 - \frac{1}{\Omega_1 - \varepsilon_{N+1} - g_N(\Omega_1)}\right) \delta\left(z_2 - \frac{1}{\Omega_2 - \varepsilon_{N+1} - g_N(\Omega_2)}\right) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{N+1}) \right\rangle = \quad (608) \\ &= \left\langle \delta\left(z_1 - \frac{1}{\Omega_1 - \varepsilon - g_N(\Omega_1)}\right) \delta\left(z_2 - \frac{1}{\Omega_2 - \varepsilon - g_N(\Omega_2)}\right) \delta(\varepsilon - \beta\varepsilon_N - [1 - \beta]\xi_{N+1}) \right\rangle = \\ &= \int_R dz'_1 dz'_2 \int d\varepsilon' d\xi P(\xi) \rho(z'_1, z'_2, \varepsilon') \delta\left(z_1 - \frac{1}{\Omega_1 - \varepsilon - z'_1}\right) \delta\left(z_2 - \frac{1}{\Omega_2 - \varepsilon - z'_2}\right) \delta(\varepsilon - \beta\varepsilon' - [1 - \beta]\xi) \end{aligned}$$

Как обычно, при $N \rightarrow \infty$ (термодинамический предел), должно быть $\rho = \tilde{\rho}$ (условие стационарности статистики) и, выполняя в (608) интегрирования с δ -функциями (см. формулу (606)), получаем для стационарной совместной функции распределения $\rho(z_1, z_2, \varepsilon)$ следующее замкнутое уравнение:

$$\beta|z_1|^4|z_2|^4\rho(z_1, z_2, \varepsilon) = \int d\xi P(\xi) \rho\left(\Omega_1 - \varepsilon - \frac{1}{z_1}, \Omega_2 - \varepsilon - \frac{1}{z_2}, \frac{\varepsilon - [1 - \beta]\xi}{\beta}\right) \quad (609)$$

Ниже нам потребуются функции Грина с предельно малыми разнознаковыми мнимыми частями энергетических аргументов. В полной аналогии с тем, как это было сделано в Главах 4, 5, 6 и 7 нашей диссертационной работы, это обстоятельство можно использовать для сведения задачи к анализу уравнения для совместной статистики *вещественных* КФГ и энергии крайнего узла:

$$\beta x_1^2 x_2^2 \sigma(x_1 x_2, \varepsilon) = \int d\xi P(\xi) \sigma\left(U_1 - \varepsilon - \frac{1}{x_1}, U_2 - \varepsilon - \frac{1}{x_2}, \frac{\varepsilon - [1 - \beta]\xi}{\beta}\right) \quad (610)$$

Как показано ранее в Главе 4, для вычисления динамики возбуждения на краевом узле достаточно вычислить среднее значение произведения вещественной части $g_N(U_1 + iV_1)$ на мнимую часть $g_N(U_2 - iV_2)$. В предыдущих главах эта величина обозначалась символом $\langle y_2 x_1 \rangle$. При этом интересующий нас критерий Андерсона выражается следующей формулой

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{\pi^2} \int dU_1 dU_2 e^{i(U_1 - U_2)t} \langle y_2 x_1 \rangle \quad (611)$$

При $V_{1,2} \rightarrow +0$ справедлива следующая формула

$$\langle y_2 x_1 \rangle = \frac{\pi}{\beta} \int \frac{dx}{x} d\varepsilon d\xi P(\xi) \sigma\left(U_1 - \varepsilon - x, U_2 - \varepsilon, \frac{\varepsilon - [1 - \beta]\xi}{\beta}\right) \quad (612)$$

Наконец, используя уравнение (610) для функции $\sigma(x_1 x_2, \varepsilon)$, получаем, по-видимому, наиболее удобное выражение для $\langle y_2 x_1 \rangle$:

$$\langle y_2 x_1 \rangle = \pi \lim_{a \rightarrow \infty} \int d\varepsilon dx a^2 \sigma(x, a, \varepsilon) x \quad (613)$$

Для вычисления функции $W(U)$ необходима только сингулярная по разности энергетических аргументов $U_2 - U_1 \equiv \omega$ часть функции $\sigma(x_1 x_2, \varepsilon)$, причем, как показано в Главе 4, эта сингулярность имеет вид полюса. После переобозначения $U_1 \rightarrow U$, функция $\sigma(x_1 x_2, \varepsilon)$ при малых ω может быть записана в виде:

$$\text{sing } \sigma(x_1 x_2, \varepsilon) = \frac{1}{\omega} \mathcal{F}_U(x_1 x_2, \varepsilon) \quad (614)$$

Если известна функция $\mathcal{F}_U(x_1 x_2, \varepsilon)$, то функция $W(U)$ и критерий Андерсона D могут быть рассчитаны как:

$$W(U) = \lim_{a \rightarrow \infty} a^2 \int dx d\varepsilon \mathcal{F}_U(x, a, \varepsilon) \quad D = \int W(U) dU \quad (615)$$

Вывод формул (610 – 615) полностью аналогичен выводу многократно встречавшихся в диссертации подобных формул (см., например, текст, сопровождающий формулы (311, 370, 461, 463, 496, 552, 553)).

Таким образом, задача сводится к отысканию сингулярной части $\mathcal{F}(x_1x_2, \varepsilon)/\omega$ решения уравнения (610). В следующем разделе для решения этой задачи будет развита теория возмущений, в которой параметром малости является обратный радиус корреляции $1/R = -\ln \beta$ и получены следующие выражения для критерия Андерсона D и спектральной зависимости степени локализации $W(U)$

$$W(U) = \frac{\bar{\Delta}^2}{4\pi R} \operatorname{Re} \int \frac{d\varepsilon \mathcal{P}(\varepsilon)}{\sqrt{4 - (U - \varepsilon)^2}} + O(1/R^2), \quad D = \int W(U) dU = \frac{\bar{\Delta}^2}{4R} + O(1/R^2), \quad (616)$$

применимые для коррелированной диагонально разупорядоченной цепочки при больших радиусах корреляции. Обратим внимание на то, что эти формулы могут работать и тогда, когда $\bar{\Delta} > 1$, т.е. при значительных величинах беспорядка.

0.9.2 Приближение больших радиусов корреляции

Пусть радиус корреляции R очень большой и, следовательно, $\beta \approx 1$. Для отыскания приближенного решения уравнения (610) построим теорию возмущений по малому параметру $y \equiv 1 - \beta > 0$ ($y \approx 1/R$). Будем считать, что функция распределения энергий узлов имеет вид (602) причем $\bar{\Delta}$ фиксировано и необязательно мало. Это означает, что ширина Δ функции распределения вспомогательных величин ξ_n (601) будет увеличиваться при $\beta \rightarrow 1$. Таким образом, функция распределения $P(\xi)$ вспомогательных величин ξ_n будет зависеть от β и иметь вид

$$P(\xi) = \frac{1}{\Delta} \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(\xi/\Delta)^2} \quad \Delta = \bar{\Delta} \sqrt{\frac{1+\beta}{1-\beta}} \quad (617)$$

Для дальнейшего удобно перейти в (610) к новой функции $\mathcal{R}(x_1, x_2, y)$ по правилу:

$$\mathcal{R}(U_1 - \varepsilon - x_1, U_2 - \varepsilon - x_2, \beta\varepsilon) \equiv \sigma(x_1, x_2, \varepsilon) \quad (618)$$

Тогда из (610) для функции $\mathcal{R}(x_1x_2, \varepsilon)$ получается следующее уравнение:

$$\beta \frac{\mathcal{R}(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \beta\varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} = \int P(\xi) \mathcal{R}(x_1, x_2, \varepsilon - y\xi) d\xi \quad (619)$$

Рассмотрим интеграл в правой части (619). Функция $P(\xi)$ существенно отлична от нуля при $\xi \in [-\Delta, \Delta]$, а соответствующая область, в которой меняется фигурирующая в (615) величина ξy , оценивается как $\Delta y = \bar{\Delta} \sqrt{1 - \beta^2} \approx \bar{\Delta} \sqrt{2y}$, т.е. стремиться к нулю при $\beta \rightarrow$

1. Поэтому при малом y правую часть (619) можно разложить в ряд до второго члена (первый выпадает потому что первый момент функции $P(\xi)$ равен нулю):

$$\beta \frac{\mathcal{R}(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \beta\varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} = \mathcal{R}(x_1, x_2, \varepsilon) + \frac{\partial^2 \mathcal{R}(x_1 x_2, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \frac{y^2 \Delta^2}{4} \quad (620)$$

Здесь мы воспользовались тем, что для функции (601)

$$\int d\xi \xi^2 P(\xi) = \frac{\Delta^2}{2}$$

Подставляя Δ из (617), получаем

$$\beta \frac{\mathcal{R}(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \beta\varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} = \mathcal{R}(x_1, x_2, \varepsilon) + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 \mathcal{R}(x_1 x_2, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \bar{\Delta}^2 (1 - \beta^2) \quad (621)$$

Последнее слагаемое обращается в нуль при $\beta = 1$, поэтому в интересующем нас случае $\beta \approx 1$, уравнение (621) можно переписать так:

$$\beta \frac{\mathcal{R}(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \beta\varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} = \mathcal{R}(x_1, x_2, \varepsilon) + \frac{\partial^2 \mathcal{R}(x_1 x_2, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} \frac{y \bar{\Delta}^2}{2} \quad (622)$$

Теперь примем во внимание, что функция \mathcal{R} непосредственно зависит от y . В линейном приближении эта зависимость имеет вид:

$$\mathcal{R}(x_1 x_2, \varepsilon) = \mathcal{R}_0(x_1 x_2, \varepsilon) + y \mathcal{R}_1(x_1 x_2, \varepsilon) + \dots \quad (623)$$

Подставим это выражение в (622) и приравняем коэффициенты при равных степенях y . При y^0 получаем

$$\frac{\mathcal{R}_0(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} = \mathcal{R}_0(x_1 x_2, \varepsilon) \quad (624)$$

Учитывая это, и приравнивая коэффициенты при y , получаем:

$$\begin{aligned} & [\mathcal{H}_{U_1 - \varepsilon}(x_1) \mathcal{H}_{U_2 - \varepsilon}(x_2) - 1] \mathcal{R}_1(x_1 x_2, \varepsilon) \equiv \\ & \equiv \frac{\mathcal{R}_1(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \varepsilon)}{x_1^2 x_2^2} - \mathcal{R}_1(x_1 x_2, \varepsilon) = \\ & = \frac{\bar{\Delta}^2}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{R}_0(x_1 x_2, \varepsilon)}{\partial \varepsilon^2} + \frac{\varepsilon}{x_1^2 x_2^2} \frac{\partial \mathcal{R}_0(U_1 - \varepsilon - 1/x_1, U_2 - \varepsilon - 1/x_2, \theta)}{\partial \theta} \Big|_{\theta=\varepsilon} + \mathcal{R}_0(x_1 x_2, \varepsilon) \equiv \mathcal{A} \end{aligned} \quad (625)$$

Здесь мы ввели уже встречавшийся нам ранее функциональный оператор $\mathcal{H}_U(x)$ [33, 41], действующий на произвольную функцию $f(x)$ по следующему правилу $\mathcal{H}_U(x)f(x) \equiv f(U -$

$1/x)/x^2$. Из Приложения 2 известно, что собственная функция этого оператора, соответствующая единичному собственному числу, есть лоренциан (392). Имея это в виду, нетрудно убедиться в том, что из (624) вытекает следующее выражение для \mathcal{R}_0 :

$$\mathcal{R}_0(x_1x_2, \varepsilon) = \mathcal{L}_{U_1-\varepsilon}(x_1)\mathcal{L}_{U_2-\varepsilon}(x_2)\mathcal{P}(\varepsilon) \quad (626)$$

где лоренциан $\mathcal{L}_U(x)$ (см. формулу(392)) является собственной функцией оператора $\mathcal{H}_U(x)$, соответствующей единичному собственному числу, а $\mathcal{P}(\varepsilon)$ есть функция распределения узельных энергий в форме (602). Прямая проверка показывает, что функция $\mathcal{P}(\varepsilon)$ (602) удовлетворяет уравнению

$$\frac{\bar{\Delta}^2}{2} \frac{d^2\mathcal{P}}{d\varepsilon^2} + \frac{d\mathcal{P}}{d\varepsilon} \varepsilon + \mathcal{P}(\varepsilon) = 0, \quad (627)$$

которое получается из уравнения (625), если его проинтегрировать по x_1 и x_2 .

Чтобы решить функциональное уравнение (625) для первой не исчезающей поправки \mathcal{R}_1 разложим правую и левую части (625) по собственным функциям $\sigma_{U_1-\varepsilon}^n(x_1)\sigma_{U_2-\varepsilon}^m(x_2)$ оператора $\mathcal{H}_{U_1-\varepsilon}(x_1)\mathcal{H}_{U_2-\varepsilon}(x_2)$, так как это уже не раз делалось в предыдущих главах диссертации. Для этого представим \mathcal{R}_1 в виде ряда:

$$\mathcal{R}_1(x_1x_2, \varepsilon) = \sum_{nm} C_{nm}\sigma_{U_1-\varepsilon}^n(x_1)\sigma_{U_2-\varepsilon}^m(x_2) \quad (628)$$

Приведем здесь для связности повествования полученные в Приложении 2 явные выражения для собственных функций $\sigma_U^n(x)$ и собственных значений λ_n оператора $\mathcal{H}_U(x)f(x) \equiv f(U - 1/x)/x^2$ при $|U| < 2$:

$$\sigma_U^n(x) = \mathcal{L}_U(x) \left[\frac{R_U^* - x}{R_U - x} \right]^n \equiv \mathcal{L}_U(x) G_U^n(x), \quad \lambda_n = \left(\frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{U - i\sqrt{4 - U^2}} \right)^n, \quad |\lambda_n| = 1 \quad (629)$$

где

$$G_U(x) \equiv \frac{R_U^* - x}{R_U - x} \quad R_U \equiv \frac{U + i\sqrt{4 - U^2}}{2} \quad \mathcal{L}_U(x) \equiv \frac{1}{2\pi i} \left[\frac{1}{x - R_U} - \frac{1}{x - R_U^*} \right] \quad (630)$$

а также полученное в Приложении 2 правило проектирования на систему функций (629), которое заключается в том, что произвольная функция $f(x)$ может быть представлена в виде ряда:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} A_n \sigma_U^n(x), \quad \text{где } A_n = \int \frac{f(x)}{G_U^n(x)} dx \quad (631)$$

Имея все это в виду получаем для коэффициентов в (628) следующие выражения:

$$C_{nm} = \frac{A_{nm}}{\lambda_n(U_1 - \varepsilon)\lambda_m(U_2 - \varepsilon) - 1} \quad A_{nm} = \int \frac{\mathcal{A}(x_1x_2) dx_1 dx_2}{G_{U_1-\varepsilon}^n(x_1)G_{U_2-\varepsilon}^m(x_2)} \quad (632)$$

Напомним, что нам необходима лишь сингулярная по $\omega = U_2 - U_1$ часть \mathcal{R}_1 , которой соответствуют члены разложения с $n = -m$ [41] – именно у этих членов (632) знаменатель обращается в нуль при $U_1 = U_2$. Для малых $\omega \equiv U_2 - U_1$ справедливо разложение

$$1 - \lambda_n(U_1 - \varepsilon)\lambda_{-n}(U_1 + \omega - \varepsilon) = -\frac{2m\omega}{\sqrt{4 - (U_1 - \varepsilon)^2}} + O(\omega^2) \quad (633)$$

В интересующую нас сингулярную часть даст вклад только первое слагаемое в выражение (625) для \mathcal{A} и мы приведем расчет только для этого слагаемого.⁵¹ Назовем соответствующие коэффициенты разложения $A_{n,-n} \equiv a_n$. На этом этапе расчета можно выравнять обе энергии $U_1 = U_2 \equiv U$ – особенность дается только знаменателем членов (632) с $n = -m$.

$$a_n = \frac{\bar{\Delta}^2}{2} \frac{d^2}{d\theta^2} \int \frac{dx_1 dx_2 \mathcal{R}_0(x_1 x_2, \theta)}{G_{U-\varepsilon}^n(x_1) G_{U-\varepsilon}^{-n}(x_2)} \Big|_{\theta=\varepsilon} \quad (634)$$

Как и в Главе 4, определим величины $J_n(\theta)$ следующим образом:

$$J_n(\theta) \equiv \int \frac{\mathcal{L}_{U-\theta}(x) dx}{G_{U-\varepsilon}^n(x)}, \quad J_{-n}(\theta) = J_n^*(\theta), \quad J_n(\varepsilon) = 0, \quad n \neq 0 \quad (635)$$

Используя выражения (630) и интегрируя по вычетам можно показать, что

$$J_n(\theta) = \left(\frac{R_{U-\varepsilon} - R_{U-\theta}}{R_{U-\varepsilon}^* - R_{U-\theta}} \right)^n, \quad n > 0 \quad (636)$$

Тогда

$$a_n = \frac{\bar{\Delta}^2}{2} \frac{d^2}{d\theta^2} |J_n(\theta)|^2 \mathcal{P}(\theta) \Big|_{\theta=\varepsilon} \quad (637)$$

Тогда для сингулярной части функции $\sigma(x_1 x_2, \varepsilon)$ (обозначим ее символом "sing") получаем выражение вида (611)⁵²:

$$\text{sing } \sigma(x_1 x_2, \varepsilon) = \frac{1}{\omega} \mathcal{F}_U(x_1 x_2, \varepsilon) \quad \text{где} \quad (638)$$

$$\mathcal{F}_U(x_1 x_2, \varepsilon) = -\frac{i\gamma}{2} \sqrt{4 - (U - \varepsilon)^2} \sum_{n \neq 0} \frac{a_n}{n} \sigma_{U-\varepsilon}^n(U - \varepsilon - x_1) \sigma_{U-\varepsilon}^{-n}(U - \varepsilon - x_2)$$

и величины a_n определяются формулой (637). Отличим β от единицы в σ -функциях и в коэффициентах $A_{n,-n} = a_n$ можно пренебречь (они зависят от ε и, следовательно, их надо взять от аргумента $\beta\varepsilon$ при переходе от $\mathcal{R}(x_1 x_2, \varepsilon)$ к $\sigma(x_1 x_2, \varepsilon)$ по формуле (618)). Прямой

⁵¹Проведя расчеты по приведенной ниже схеме, можно убедиться в том, что остальные слагаемые в выражении (625) для \mathcal{A} не дают вклада.

⁵²Эта часть связана с сингулярной частью функции \mathcal{R} заменой переменных (618)

расчет показывает, что ненулевыми будут только члены суммы (638) с $n = \pm 1$. Используя (636) и (637), получаем для $a_1 = a_{-1}$ следующее выражение:

$$a_1 = \mathcal{P}(\varepsilon) \frac{\bar{\Delta}^2}{[4 - (U - \varepsilon)^2]^2} \quad (639)$$

Имея ввиду доказанные в Главе 4 и Приложении 2 свойства функций (629)

$$\int \sigma_U^n(x) x dx = \frac{i}{2} \frac{n}{|n|} \sqrt{4 - U^2} \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \sigma_U^{-n}(a) a^2 = \frac{\sqrt{4 - U^2}}{2\pi} \quad (640)$$

и вспоминая, что $y = 1/R$ (где R – радиус корреляции, предполагаемый большим), с помощью формул (615) получаем для $W(U)$ и остаточной плотности D выражения (616).

На рис.29 приведены результаты численной проверки формулы (616). Рис.29а получен при следующих значениях параметров $\bar{\Delta} = 0.5$ и $R = 5$. Вследствии небольшого значения радиуса корреляции, рис.29а демонстрирует лишь качественное соответствие между теорией и численным экспериментом. Из рис.29б, который получен при $\bar{\Delta} = 5$ и $R = 50$, видно, что увеличение радиуса корреляции приводит к улучшению согласия теоретической и численной зависимостей, что совершенно естественно, т.к. формулы (616) получены в приближение больших значений радиуса корреляции.

0.9.3 Заключение

В настоящей главе диссертации продемонстрировано, что предложенный метод построения совместной статистики функций Грина оказывается работоспособным при рассмотрении коррелированных низкоразмерных разупорядоченных систем. При этом оказывается возможным построить простую теорию возмущений для статистики функций Грина, в которой параметром малости является обратный радиус корреляции. Интересно, что величина диагонального беспорядка (в масштабе взаимодействия, переносящего экситон) при этом может быть весьма значительна.

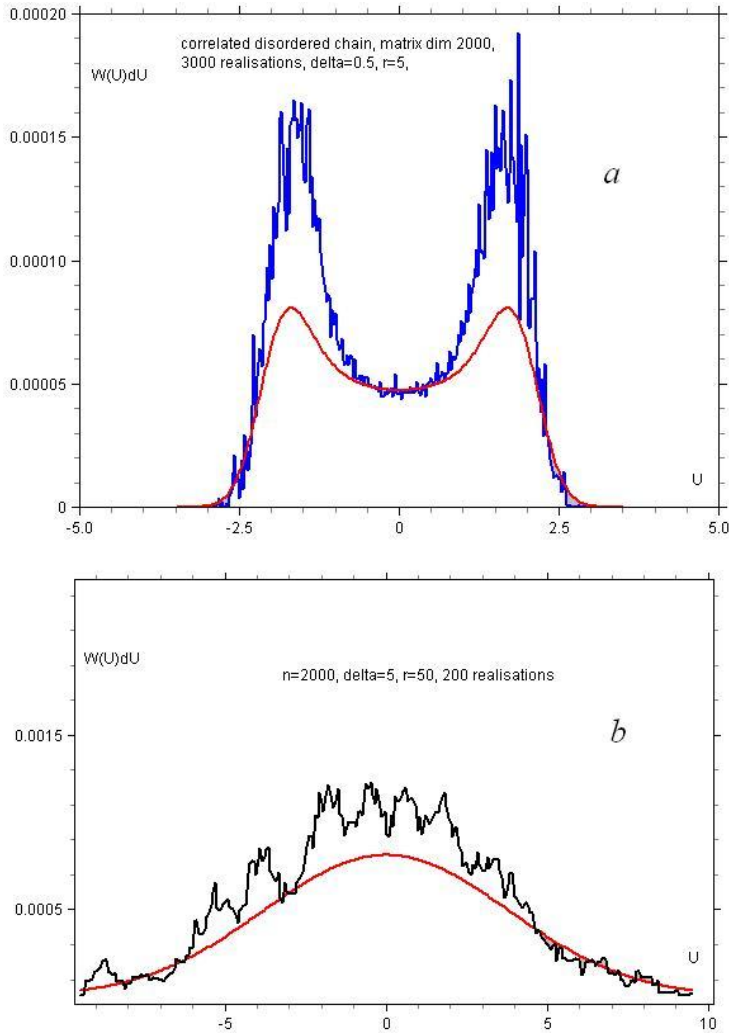


Рис. 29: Спектральные зависимости степени локализации в одномерных коррелированных цепочках при различных значениях степени разупорядочения и радиусов корреляции. Размер случайной матрицы во всех случаях 2000. Зашумленные графики соответствуют компьютерному эксперименту, гладкие – получены с помощью формулы (616) без какой-либо подгонки.

0.10 МЕТОД СЛЕДЯЩИХ ОПЕРАТОРОВ В ТЕОРИИ ЭКСИТОНА ФРЕНКЕЛЯ. НОВАЯ МЕРА ЛОКАЛИЗАЦИИ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И ЕЕ ТОЧНОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ ДЛЯ 0-СОСТОЯНИЯ ОДНОМЕРНОЙ НЕДИАГОНАЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ ЦЕПОЧКИ.

Эта глава диссертационной работы посвящена предложенному автором методу манипулирования диаграммным разложением функции Грина и выполненному с помощью этого метода *точному* расчету степени локализации так называемого 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочки [43, 69, 70]. При этом основным инструментом и объектом изучения по-прежнему служит функция Грина матрицы типа (4), исследуемая в данной диссертационной работе. Кратко опишем приведенные в этой главе результаты.

Описанный в обзорной части диаграммный способ изображения членов разложения функции Грина позволяет классифицировать эти члены по топологическим признакам соответствующих диаграмм, что, в свою очередь, дает возможность написать (по крайней мере, формальные) выражения для практически любых усредненных функций Грина, которые могут представлять интерес. При этом упомянутые формальные выражения отличаются от таковых для функции Грина упорядоченной системы только тем, что в них целые бесконечные подпоследовательности диаграмм, имеющих некоторый топологический признак и входящих в разложение упорядоченной функции Грина, учитываются с весом, определяемым этим признаком и статистикой беспорядка. Таким признаком может быть число узлов, через которые проходит диаграмма, число посещений диаграммой какого-либо узла, число самопересечений диаграммы и др. Поэтому при построении разложений усредненных функций Грина разупорядоченных моделей возникает желание манипулировать диаграммами *упорядоченной* функции Грина с помощью некоторого гипотетического наблюдателя, который, двигаясь по диаграмме, следил бы за ее топологией, домножая диаграмму на требуемый весовой фактор. В первых разделах этой главы по-

казано, что замена матричных элементов в разложении функции Грина на некоторые специальным образом построенные *следающие операторы* позволяет в ряде случаев получить математическую реализацию такого наблюдателя.

В последующих разделах данной главы методом следящих операторов выполнено исследование нестационарного случайного процесса, который возникает при построении волновой функции так называемого 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной модели[43]. При этом каждой реализации этого случайного процесса ставится в соответствие диаграмма из разложения упорядоченной функции Грина матрицы (4), элементы которой выбираются так, что величина диаграммы равна вероятности соответствующей реализации случайного процесса. Далее вводится мера локализации состояния, представляющая собой обратное число узлов решетки, "накрываемых" соответствующей волновой функцией и с помощью модификации диаграммного разложения надлежащими следящими операторами, производится точное вычисление указанной меры для 0-состояния недиагонально-разупорядоченной цепочки. Как и везде в данной диссертационной работе, приводятся результаты компьютерной проверки полученных результатов.

0.10.1 Постановка задачи

Как было сказано выше, нашей задачей будет разработка метода модификации диаграммного разложения упорядоченной функции Грина, при которой диаграммы этой функции контролируемым образом приобретают веса, определяемые некоторым их топологическим признаком, который, в свою очередь, задается конкретной задачей. Несколько ниже мы приведем поясняющие примеры. Исходным объектом при этом является функция Грина матрицы типа (4) при *отсутствии диагонального беспорядка*, т.е. когда все величины $\varepsilon_r = 0$. Нам будет удобно записать эту функцию Грина в безразмерном виде, для чего определим матрицу \mathbf{W} со следующими элементами (см. формулу (4)):

$$W_{rr'} = w(r - r')/E, \quad (641)$$

а соответствующую безразмерную функцию Грина запишем в виде:⁵³

$$\mathbf{G} = (1 - \mathbf{W})^{-1} \quad (642)$$

Предполагая суммирование по повторяющимся индексам для этой функции Грина можно написать следующее разложение:

$$G_{lm} = \left(\frac{1}{1 - \mathbf{W}} \right)_{lm} = \delta_{lm} + W_{lm} + W_{lr}W_{rm} + W_{lr}W_{rp}W_{pl} + \dots \quad (643)$$

Применим к этому ряду диаграммный метод, описанный в обзорной части диссертации. Если каждому матричному элементу W_{rp} сопоставить стрелку, направленную из узла r в узел p , то произвольному произведению матричных элементов в суммах (643) сопоставляется траектория – диаграмма – соединяющая узлы l и m . Тогда формула (643) может быть записана в следующем виде:

$$G_{lm} = \left(\text{Сумма всех диаграмм, соединяющих узлы } l \text{ и } m \right) \quad (644)$$

Похожая диаграммная техника применялась в [26]. Такое представление позволяет единым образом записать функции Грина целого ряда родственных задач. Например, если мы имеем дело с моделью, в которой из узлов решетки $r_1 \dots r_t$ двухуровневые атомы удалены, то соответствующая функция Грина может быть формально представлена в следующем виде:

$$G_{lm} = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, соединяющих узлы } l \text{ и } m \\ \text{и непроходящих через узлы } r_1 \dots r_t \end{cases} \quad (645)$$

В качестве второго примера рассмотрим случай когда в каждом узле решетки двухуровневый атом может находиться не достоверно, а вероятностью $c < 1$ и мы интересуемся усредненной функцией Грина такой модели. В этой функции каждая диаграмма D должна быть домножена на вероятность того, что все $n(D)$ узлов решетки, через которые она проходит, заняты атомами. Эта вероятность равна $c^{n(D)}$, поэтому для усредненной функции Грина можно написать:

$$\langle G_{lm} \rangle_c = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм } D, \text{ соединяющих узлы } l \text{ и } m \\ \text{причем каждая диаграмма домножается на } c^{n(D)}, \\ \text{где } n(D) - \text{число узлов в диаграмме} \end{cases} \quad (646)$$

⁵³Размерная функция Грина, фигурировавшая выше, связана с безразмерной следующим образом $\mathbf{G} \rightarrow \mathbf{G}/E$.

Наконец, если мы интересуемся функцией $\langle G_{lm} \rangle_c$ при $c \sim 1$, то представляет интерес производная $\partial \langle G_{lm} \rangle_c / \partial c$ при $c = 1$, для которой из (646) несложно получить следующее выражение:

$$\frac{\partial \langle G_{lm} \rangle_c}{\partial c} = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм } D, \text{ соединяющих узлы } l \text{ и } m \\ \text{причем каждая диаграмма домножается на } n(D), \\ \text{где } n(D) \text{ – число узлов в диаграмме} \end{cases} \quad (647)$$

Эти примеры показывают, что манипулируя одним и тем же множеством диаграмм, можно получать функции Грина, относящиеся к существенно различным задачам. Таким образом, возникает желание получить в распоряжение некоего гипотетического наблюдателя, который, двигаясь по диаграмме, следил бы за тем, какие узлы она посетила, считал бы их число и т.п. Например, для получения функции Грина (645) требуется наблюдатель, который, двигаясь по диаграмме и попав в очередной узел, проверял бы не является ли этот узел одним из $r_1 \dots r_t$ узлов, атомы из которых удалены и, если это так, домножал бы диаграмму на нуль. Для получения функций (647) и (646), наблюдатель должен считать узлы, по которым прошла диаграмма, и домножить диаграмму на их число $n(D)$ или на $c^{n(D)}$. В следующем разделе этой главы мы покажем, что в ряде случаев возможно получить математическую реализацию такого наблюдателя, заменив матричные элементы W_{rp} в исходной функции Грина (644) на специально построенные *следающие операторы*. К сожалению, рассмотренные в следующем разделе задачи теории случайных блужданий, которые пока удалось до конца решить таким способом, довольно просты и имеют скорее иллюстративное значение. Однако, в заключительном разделе этой главы мы рассмотрим гораздо менее тривиальную задачу о степени локализации 0-состояния в одномерной цепочке с экситоном Френкеля [43], которая допускает формулировку на диаграммном языке и *точно* решается с помощью специально построенной функции Грина типа (644) и манипулирования ее диаграммами с помощью специальных следающих операторов.

0.10.2 Следящие операторы

Пример: удаление узлов

Рассмотрим функцию Грина G_{0r} (642) определенную на трансляционно-симметричной решетке и проведем по второму индексу преобразование Фурье

$$g_k \equiv \sum_r G_{0r} \exp(ikr).$$

Как известно, в этом случае:

$$g_k = \frac{1}{1 - f_k}, \quad \text{где} \quad f_k \equiv \sum_r W_{0r} \exp(ikr) \quad (648)$$

или на диаграммном языке:

$$g_k = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, выходящих из узла } 0, \text{ причем} \\ \text{каждая диаграмма домножается на } \exp(ikr_f), \text{ где } r_f, \\ \text{координата последнего узла в диаграмме.} \end{cases} \quad (649)$$

Рассмотрим теперь задачу (645) причем обозначим совокупность координат узлов, в которых атомы остались, через L , а совокупность $r_1 \dots r_t$ через T . Для того чтобы получить из (649) функцию Грина такой дефектной системы заменим в (649) матричные элементы W_{rp} (соответствующие стрелкам в диаграммах) на операторы \tilde{W}_{rp} , которые действуют на произвольную функцию J_q от вспомогательной переменной q из обратного пространства исходной симметричной решетки по правилу:

$$\tilde{W}_{rp} J_q \equiv \frac{W_{rp}}{N} \sum_{q'} K(q - q') e^{iq'(p-r)} J'_{q'}, \quad \text{где} \quad K(q) \equiv \sum_{R \in L} \exp(iqR) \quad (650)$$

Здесь N – полное число узлов исходной симметричной решетки, а суммирование по q идет по первой зоне Бриллюэна этой решетки. После такой замены функция Грина (649) превратится в оператор $g_k \rightarrow \tilde{g}_k$, которым мы подействуем на единицу. Рассмотрим какую-либо диаграмму из (649) и применим оператор, соответствующий первой стрелке, к единице: $\tilde{W}_{0r} \cdot 1$. Нетрудно видеть, что, если $r \in L$, то получится $W_{0r} \exp(iqr)$. В противном случае получается ноль. Таким образом, если первая стрелка диаграммы попадает в пустой узел, происходит умножение диаграммы на ноль. По индукции можно убедиться в том, что это общий результат: если на каком-либо шаге (стрелке) диаграмма дошла до

узла ρ , атом из которого удален (т.е. ρ один из $r_1 \dots r_t$), то оператор, соответствующий этому шагу дает нуль. Мы видим, что операторы (650) представляют собой математическую реализацию наблюдателя, о котором шла речь в конце предыдущего раздела, поэтому назовем их *следящими*. Таким образом, если обозначить функцию Грина дефектной решетки через d_q , то справедлива формула:

$$\tilde{g}_k 1 = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, выходящих из узла 0,} \\ \text{и непроходящих через узлы } r_1 \dots r_t, \text{ причем каждая,} \\ \text{диаграмма домножается на } \exp(i(k+q)r_f), \text{ где } r_f, \\ \text{координата последнего узла в диаграмме.} \end{cases} = d_{k+q} \quad (651)$$

Заменяя в явном выражении (648) для g_k (649) величины $W_{0r} = w(r)/E$ на следящие операторы (650) и полагая $k = 0$ получаем уравнение для d_q :

$$1 = (1 - \tilde{f}_0)d_q, \quad \text{где } \tilde{f}_0 \equiv \sum_r \tilde{W}_{0r} \quad (652)$$

Несложные выкладки показывают, что d_q может быть представлена в виде:

$$d_q = \frac{1 - \sum_{R \in T} X_R \exp(iqR)}{1 - f_q}, \quad (653)$$

где величины X_R определяются из системы уравнений:

$$\sum_{R' \in T} G_{R-R'} X_{R'} = G_R, \quad R \in T, \quad (654)$$

где

$$G_R \equiv \frac{1}{N} \sum_q \frac{e^{-iqR}}{1 - f_q} \quad (655)$$

функция Грина, соответствующая симметричной решетке. Если удаленных атомов немного, то решение (654) может быть обзримым. Например, если удален всего один атом из узла R , то $X_R = G(R)/G(0)$. Не останавливаясь на этом подробно, заметим, что дальнейший анализ (654) возможен также, если пустые узлы образуют периодическую структуру. Обратим внимание на то, что при получении (654) мы предположили, что узел $0 \in L$. В противном случае, очевидно, должно быть $d_q = 0$. Формулы (653) и (654) дают это (в этом случае $X_0 = 1, X_{R \neq 0} = 0$), однако, точное решение (652) ненулевое и представляет собой в этом случае сумму диаграмм, которые, выйдя из нуля, больше туда не возвращаются. Наконец, отметим, что начальный узел 0 ничем не выделен и аналогичным способом можно получить функцию Грина дефектной решетки при любом другом первом индексе.

Пример: первый член разложения по концентрации пустых узлов

Рассмотрим теперь другой тип следящих операторов, позволяющий умножать диаграммы на величины, несущие информацию об узлах, через которые она прошла. Введем, как и выше, в функцию Грина (649) зависящие от параметра α следящие операторы, действующие на произвольную функцию J_q следующим образом:

$$\tilde{W}_{pr} J_q \equiv W_{pr} \left(1 + \frac{\alpha - 1}{N} \sum_q \right) e^{iq(r-p)} J_q \quad (656)$$

Применим какую-либо диаграмму D ⁵⁴ полученного оператора \tilde{g}_k к некоторой произвольной функции, которую мы представим в виде суммы плоских волн: $\Phi_q \equiv \sum_R \phi_R \exp(-iqR)$ (сумма по всей решетке). Оператор, соответствующий первой стрелке диаграммы, действует так: $\tilde{W}_{0r} \Phi_q = W_{0r} \exp(iqr) \Phi'_q$, где $\Phi'_q = \sum_R \phi'_R \exp(-iqR)$, причем $\phi'_R = \phi_R$ при $R \neq r$ и $\phi'_r = \alpha \phi_r$. Двигаясь дальше по диаграмме и применив последовательно соответствующие стрелкам следящие операторы, нетрудно убедиться в том, что диаграмма D окажется домноженной на $\exp(iqr_f(D)) \tilde{\Phi}_q(D) = \exp(ir_f(D)) \sum_R \tilde{\phi}_R(D) \exp(-iqR)$, причем при $R \neq 0$,

$$\tilde{\phi}_R(D) = \phi_R \alpha^{\text{(число посещений диаграммой } D \text{ узла } R)}.$$

Здесь $r_f(D)$ – конечный узел диаграммы D . Начальный узел 0, из которого диаграмма вышла, учитывается особо:

$$\tilde{\phi}_0(D) = \phi_0 \alpha^{\text{(число посещений диаграммой } D \text{ узла начального узла - 1)}}.$$

Следовательно, $\tilde{\Phi}_q(D)$ несет информацию о том, через какие узлы и сколько раз диаграмма D прошла, поэтому назовем эту функцию *носителем*. О функции Φ_q (произвольной) будем говорить как о *носителе в исходном состоянии*. Таким образом, применение \tilde{g}_k со следящими операторами (656) к носителю в исходном состоянии Φ_q приводит к тому, что каждая диаграмма умножается на свой собственный носитель.

Решим теперь задачу (647) при помощи следящих операторов (656). Из вышеизложенного следует, что, если носитель в исходном состоянии взять в виде: $\Phi_q = \sum_{R \neq 0} \exp(-iqR) + \alpha = N\delta_{q0} + \alpha - 1$ и применить к нему \tilde{g}_k со следящими операторами (656), то справедлива

⁵⁴т.е. соответствующий ей оператор

формула:

$$\tilde{g}_k \Phi_q = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, выходящих из узла } 0. \text{ Каждая} \\ \text{диаграмма домножается на носитель } \sum_R e^{-iqR} \alpha^{V(D,R)}, \\ \text{где } V(D, R) - \text{число посещений диаграммой } D \text{ узла } R. \quad \equiv \gamma_q \\ \text{Также диаграмма домножается на } e^{i(k+q)r_f}, \text{ где } r_f - \\ \text{координата последнего узла в диаграмме.} \end{cases} \quad (657)$$

Уравнение для γ_q имеет вид: $\Phi_q = (1 - \tilde{f}_k)\gamma_q$ со следящими операторами (656) несложно решается в терминах функций Грина (648) и (655):

$$\gamma_q = N\delta_{q0} g_k + \frac{(\alpha - 1)g_{q+k}g_k}{1 - (\alpha - 1)(G_0 - 1)} \quad (658)$$

Сравнение диаграммных формул (647) и (657) показывает, что преобразование Фурье формулы (647) по второму индексу (аналогичное (648)) может быть представлено в виде:

$$\left. \frac{\partial \langle g_k \rangle_c}{\partial c} \right|_{c=1} = N g_k - \gamma_0 \Big|_{\alpha=0} = \frac{g_k^2}{G_0} \quad (659)$$

Формула (659) известна в теории разупорядоченных систем (см., например, [19]). То же можно сказать и о формуле (653) для случая одного дефекта. Поэтому в приведенных выше расчетах оригинальной является лишь их методика, а полученные результаты позволяют проверить введенные представления о следящих операторах. В следующих разделах будет описана поставленная автором гораздо менее тривиальная задача о вычислении степени локализации 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочки, [43] которая может быть точно решена при помощи следящих операторов, модифицирующих диаграммный ряд функции Грина матрицы типа (4), являющейся центральным объектом данной диссертационной работы. Краткий план следующих разделов данной главы заключается в следующем.

1. Для 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочки вводится мера локализации, представляющая собой число узлов решетки N^* , накрываемых волновой функцией 0-состояния.

2. Каждой реализации 0-состояния ставится в соответствие диаграмма функции Грина матрицы (4), элементы которой выбираются так, чтобы величина диаграммы была бы равна вероятности соответствующей реализации 0-состояния.

3. Для искомого среднего значения $\langle N^* \rangle$ получается диаграммная сумма, которая находится точно, при помощи модификации разложения упорядоченной функции Грина специально построенными следящими операторами.

0.10.3 Исследование 0-состояния экситона Френкеля методом следящих операторов

0-состояние и мера локализации

Рассмотрим заданный на одномерной цепочке узлов $i = 1, 2, 3, \dots, n$ случайный процесс φ_i , определяемый следующим рекуррентным соотношением:

$$\varphi_i = \eta_i \varphi_{i-1}, \quad \varphi_0 = 1, \quad (660)$$

где $\eta_i \equiv u_i/u'_i$, u_i и u'_i – независимые, одинаково распределенные случайные величины, принимающие с вероятностями C и $1 - C$ значения a и b соответственно (для определенности положим $a > b$). Как показано в [43], величины φ_i представляют собой квадрат модуля 0-состояния экситона Френкеля в одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочке в случае, когда матричные элементы гамильтониана могут принимать значения \sqrt{a} и \sqrt{b} с вероятностями C и $1 - C$ соответственно. Будем характеризовать 0-состояние числом N^* узлов, которое оно покрывает, определив это число из следующих соображений. Если на каком-либо узле i величина $\varphi_i = 0$,⁵⁵ то этот узел считается *не накрытым* и при подсчете N^* не учитывается. Напротив, если на некотором узле i функция φ_i достигает своего максимума φ_{max} , то такой узел считается "накрытым" максимально возможным образом и при подсчете N^* дает вклад равный единице. Рассуждая подобным образом, мы приходим к выводу, что вклад произвольного узла i равен φ_i/φ_{max} , а для полного числа узлов "накрытых" функцией φ мы получаем следующее выражение:

$$N^* = \frac{\sum_i \varphi_i}{\varphi_{max}} \quad (661)$$

Величину $1/N^*$ можно считать мерой локализации 0-состояния – она конечна в случае, если 0-состояние локализовано и стремится к нулю как обратная длина цепочки n^{-1} ,

⁵⁵В рассматриваемой нами модели случайного процесса всегда $\varphi_i \neq 0$, но для излагаемых наводящих соображений это неважно.

если 0-состояние делокализовано. Заметим, что, если $\lim_{n \rightarrow \infty} N^* < \infty$, то для усредненных величин справедлива формула:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle N^* \rangle = \langle \langle N^* \rangle \rangle \quad (662)$$

Здесь $\langle \rangle$ обозначает усреднение по реализациям случайного процесса (660), а $\langle \langle \rangle \rangle$ – усреднение по реализациям и по всевозможным длинам цепочек n . В следующем разделе мы опишем способ точного вычисления $\langle \langle N^* \rangle \rangle$.

Диаграммное представление случайного процесса φ_i и вычисление $\langle \langle N^* \rangle \rangle$

Введем диаграммное изображение случайного процесса φ_i (660) следующим образом. По определению величин η_i , для них возможны четыре случая, каждому из которых мы сопоставим вертикальные и горизонтальные стрелки единичной длины следующим образом:

$$\eta_i = \begin{cases} a/a & \uparrow = C^2t \\ b/b & \downarrow = (1-C)^2t \\ a/b & \rightarrow = (1-C)Ct \\ b/a & \leftarrow = (1-C)Ct \end{cases} \quad (663)$$

Пристраивая к стрелке, соответствующей η_1 , стрелку, соответствующую η_2 и т.д. до η_n , сопоставим произвольной реализации случайного процесса φ_i на цепочке из n узлов траекторию – диаграмму – из n стрелок на двумерной квадратной решетке, выходящую, например, из нулевого узла этой решетки. Далее, i -ой стрелке диаграммы припишем значение, равное вероятности соответствующего значения η_i , так, как это показано в (663). В этой формуле параметр $t, 0 < t < 1$ – вспомогательный и по окончании расчета $t \rightarrow 1$. Таким образом, вид диаграммы однозначно связан с распределением величин η_i в соответствующей реализации случайного процесса (660), а величина диаграммы – с вероятностью этой реализации. Покажем как связаны параметры диаграммы с интересующими нас величинами φ_{max} и $\sum_i \varphi_i$. Отнесем введенную выше квадратную решетку к системе координат XU с началом в нулевом узле. Тогда, если r есть x -проекция самого правого узла (или узлов) диаграммы, то $\varphi_{max} = \xi^r$, где $\xi \equiv a/b > 1$. Чтобы получить $\sum_i \varphi_i$ для какой-либо реализации, допустим, что нам удалось снабдить соответствующую диаграмму D носителем $\varphi_q = \sum_x V(D, x) \exp(-iqx)$, где $V(D, x)$ – число посещений диаграммой

узлов с x -проекцией (в отличии от (657)) координаты равной x . Совершая преобразование Фурье, приведем этот носитель к виду: $\phi_x(D) = V(D, x)$. Тогда $\sum_i \varphi_i = \sum_x \xi^x \phi_x$.

Теперь на рассматриваемой квадратной решетке определим матрицу \mathbf{W} (641) при помощи следующей функции $w(\mathbf{r})$ (положим $E = 1$):

$$w(\mathbf{r}) = \begin{cases} C^2 t, & \text{если } \mathbf{r} = (0, 1) \quad \uparrow \\ (1 - C)^2 t, & \text{если } \mathbf{r} = (0, -1) \quad \downarrow \\ C(1 - C)t, & \text{если } \mathbf{r} = (1, 0) \quad \rightarrow \\ C(1 - C)t, & \text{если } \mathbf{r} = (-1, 0) \quad \leftarrow \end{cases} \quad (664)$$

Пользуясь терминологией предыдущего раздела, введем следующую функцию:

$$F(q, q', k, \alpha, \beta) = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, выходящих из} \\ \text{узла 0 и умноженных на носитель} \\ \left(\sum_x e^{-iqx} \alpha^{V(D,x)} \right) \left(\sum_x e^{-iq'x} \beta^{V(D,x)} \right) \\ \text{где } V(D, x) - \text{число посещений} \\ \text{диаграммой } D \text{ узлов с } x\text{-координатой } x. \\ \text{Также каждая диаграмма домножается на} \\ e^{i(k+q+q')x_f}, \text{ где } x_f - x\text{-координата} \\ \text{последнего узла диаграммы.} \end{cases} \quad (665)$$

Определяя операцию целочисленного дифференцирования как: $Dy/Dx \equiv y(x+1) - y(x)$, введем следующую функцию $U(x, x')$:

$$U(x, x') \equiv -\frac{D}{Dx} \left(\frac{1}{N} \right)^2 \sum_{qq'} e^{i(qx+q'x')} \int_0^1 d\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial \beta} F(q, q', -q - q', \alpha, \beta) \Big|_{\beta=1} \quad (666)$$

Здесь N – число узлов решетки в x -направлении, которое в процессе расчета следует устремить к бесконечности. Диаграммное выражение для функции $U(x, x')$ следующее:

$$U(x, x') = \begin{cases} \text{Сумма всех диаграмм, выходящих из} \\ \text{узла 0 и умноженных на носитель} \\ \left(\delta_{x,r} - \delta_{x,l-1} \right) V(D, x'), \\ \text{где } V(D, x') - \text{число посещений} \\ \text{диаграммой } D \text{ узлов с } x\text{-координатой } x'. \\ r(l) - x\text{-проекция самого правого (левого)} \\ \text{узла (или узлов) диаграммы } D. \end{cases} \quad (667)$$

Поясним смысл целочисленного дифференцирования в формуле (666). После преобразования Фурье по q и интегрирования производной по α , зависимость от x носителя каждой диаграммы имеет вид *последовательно* расположенных δ -символов: $\delta_{x,r} + \delta_{x,r-1} + \delta_{x,r-2} + \dots + \delta_{x,l}$, где $r(l)$ – x -проекция самого правого (левого) узла (или узлов) диаграммы. Отсутствие пропусков в ряду δ -символов связано с тем, что стрелки, соответствующие функции $w(\mathbf{r})$ (664) могут соединять только соседние (в направлении x) узлы. Таким образом, после целочисленного дифференцирования остаются только правый $\delta_{x,r}$ и, смещенный на один узел, левый $\delta_{x,l-1}$ δ -символы. Тогда для искомого среднего числа узлов (662) справедлива формула:

$$\langle\langle N^* \rangle\rangle = \lim_{t \rightarrow 1} (1-t) \sum_{x=0}^{\infty} \sum_{x'=-\infty}^{\infty} U(x, x') \xi^{x'-x} \quad (668)$$

Множитель $1-t$ нормировочный при усреднении по всевозможным длинам цепочки и равен обратной сумме всевозможных диаграмм, т.е. g_0^{-1} (формула (648)), построенной при помощи (664). Явное выражение для функции (665) можно получить манипулируя диаграммным разложением функции Грина (648) и (649) при помощи следящих операторов следующего вида:

$$\tilde{w}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \mathbf{r} = (0, 1) & C^2 t [1 + \frac{\alpha-1}{N} \sum_q] [1 + \frac{\beta-1}{N} \sum_{q'}] \\ \mathbf{r} = (0, -1) & (1-C)^2 t [1 + \frac{\alpha-1}{N} \sum_q] [1 + \frac{\beta-1}{N} \sum_{q'}] \\ \mathbf{r} = (1, 0) & C(1-C) t [1 + \frac{\alpha-1}{N} \sum_q] [1 + \frac{\beta-1}{N} \sum_{q'}] e^{i(q+q')} \\ \mathbf{r} = (-1, 0) & C(1-C) [1 + \frac{\alpha-1}{N} \sum_q] [1 + \frac{\beta-1}{N} \sum_{q'}] e^{i(q+q')} \end{cases} \quad (669)$$

Эти операторы отличаются от (656) тем, что зависят от двух вспомогательных волновых векторов $q, q' \in [-\pi, \pi]$ и тем, что следят за движением диаграммы по двумерной решетке только в x -направлении. Применяя оператор \tilde{g}_k с операторами (669) к следующему "носителю в исходном состоянии": $(N\delta_{q_0} + \alpha - 1)(N\delta_{q'_0} + \beta - 1)$, получим стандартное уравнение для функции $F(q, q', k, \alpha, \beta)$:

$$(1 - \tilde{f}_k)F = (N\delta_{q_0} + \alpha - 1)(N\delta_{q'_0} + \beta - 1) \quad (670)$$

Не останавливаясь на довольно громоздком решении этого уравнения, укажем, что оно сводится к интегральному уравнению типа свертки, которое решается преобразованием Фурье, причем решение выражается через известную функцию Грина экситона Френкеля в одномерной решетке с переносом только между ближайшими соседями. При помощи

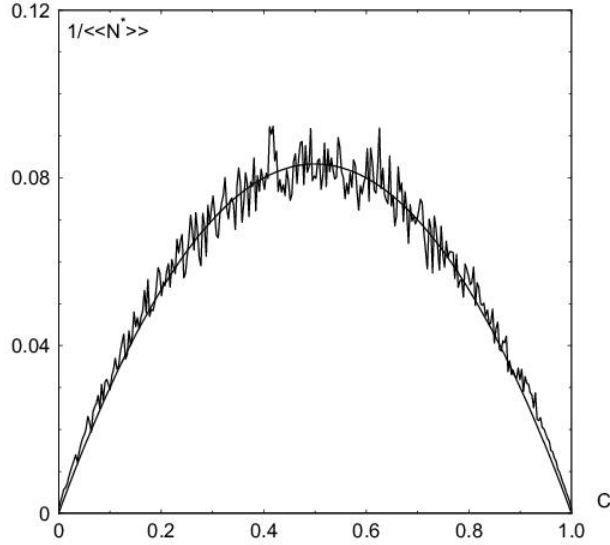


Рис. 30: Зависимость обратного среднего числа узлов $\langle\langle N^* \rangle\rangle^{-1}$, накрываемых 0-состоянием одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочки, от вероятности C . Гладкая кривая получена при помощи формулы (671), зашумленная – $\langle\langle N^* \rangle\rangle^{-1}$ полученное компьютерным моделированием случайного процесса (660). Никакой подгонки не проводилось.

(665),(666),(667) для $\langle\langle N^* \rangle\rangle$ получается следующая *точная* формула:

$$\langle\langle N^* \rangle\rangle = \frac{\xi(\xi + 1)}{(\xi - 1)^2 C(1 - C)}, \quad \xi > 1 \quad (671)$$

Формула (671) может быть проверена сличением с компьютерным "экспериментом", в котором $\langle\langle N^* \rangle\rangle$ получается компьютерной генерацией реализации случайного процесса (660) при заданных значениях параметров C и ξ , определением N^* по формуле (661) и усреднением этой величины по реализациям и длинам цепочек. Результаты такой проверки приведены на рис.30.

В заключении заметим, что рассмотренная задача вычисления $\langle\langle N^* \rangle\rangle$ не является самым простым примером применения метода следящих операторов для исследования случайного процесса (660). Применяя описанное диаграммное представление случайного процесса (660) и метод следящих операторов, можно получить такие нетривиальные, но не имеющие прямого физического смысла, характеристики (660), как функция распределения φ_{max} и зависимость $\langle\varphi_{max}\rangle$ от длины цепочки n . Одной из причин, заставивших

автора заняться расчетом обратной степени локализации (671), было иногда встречающееся утверждение, [43, 110, 111, 112] что 0-состояние делокализовано. Такое утверждение делается на том основании, что это состояние имеет нулевую обратную длину локализации $\langle 1/L \rangle$ [43]. По-видимому, этот критерий локализации является неудачным,[69, 70] т.к. (671) показывает, что в рассматриваемой модели (для которой $\langle 1/L \rangle$ также равно нулю), *0-состояние локализовано при сколь угодно малом беспорядке*. Результаты этой главы диссертации опубликованы в[68].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой части мы кратко суммируем постановку задачи диссертационной работы и полученные результаты.

В диссертации изучаются простейшие низкоразмерные твердотельные модели, описываемые гамильтонианом (4). Как показано в диссертационной работе, *несмотря* на простоту гамильтониана (4), на его примере оказывается возможным рассмотреть целый ряд задач, связанных с трансляционно-несимметричными твердотельными моделями, причем возникающие трудности методического и математического характера, по мнению автора, свойственны науке о неупорядоченных системах в целом. С другой стороны, *благодаря* простоте гамильтониана (4), при его исследовании возможен прямой компьютерный эксперимент, который позволяет за обозримое время чрезвычайно убедительно проверить получаемые для этого гамильтониана теоретические результаты. Поэтому исследование гамильтониана (4) представляется актуальным для накопления, по крайней мере, качественной (а иногда и количественной) информации о трансляционно-несимметричных системах.

Математическим инструментом, применяемым в диссертации для исследования гамильтониана (4), является аппарат функций Грина в его простейшем варианте. Во вводной и обзорной частях диссертации обоснована эффективность такого подхода. Перечислим основные результаты полученные работе.

1. Для функции Грина гамильтониана (4) разработан метод дифференциального уравнения, с помощью которого для компонент функции Грина, описывающих спектр поглощения, получается уравнение, которое в ряде нетривиальных случаев может быть решено точно.

2. Методом дифференциального уравнения получены аналитические выражения для спектров поглощения конечной одномерной цепочки, одномерной цепочки со скачком атомного расщепления и трехмерного сферического кластера.

3. Методом дифференциального уравнения получено замкнутое решение электродина-

мической задачи о прохождении света через пластинку при наличие сильных эффектов пространственной дисперсии и добавочных волн Пекара. При помощи развитого подхода оказалось возможным получить точное решение нелокальных уравнений Максвелла и последовательно преодолеть трудности, связанные с необходимостью дополнительных граничных условий.

4. В рамках метода дифференциального уравнения для функции Грина рассмотрена модель разупорядоченной системы с гиперболическими дефектами, для которой удалось получить аналитическое выражение для спектра поглощения.

5. Предложен и проанализирован эффект антизеркального отражения от конечной двумерной кристаллической полосы в области экситонного резонанса. Показано, что эта задача может быть поставлена и последовательно решена в терминах гамильтониана (4).

6. Для случайных низкоразмерных неупорядоченных систем произведено обобщение подхода Дайсона на случай систем с неограниченным спектром, при этом с помощью этого обобщения удалось получить точное решение задачи Ллойда методом Дайсона.

7. Для бинарно разупорядоченной одномерной системы показано, что статистика соответствующей краевой функции Грина имеет фрактальный характер. Для расчета этой статистики предложен алгоритм, допускающий аналитическое продолжение получаемых средних на область спектра бинарно-неупорядоченного гамильтониана.

8. Для равномерно разупорядоченной одномерной системы в некотором (указанном явно) интервале области определения получено точное решение уравнения Дайсона для статистики краевой функции Грина. Для расчета статистики в дополнительной области предложен эффективный алгоритм, позволяющий получить замкнутое трансцендентное уравнение для усредненной функции Грина и явную формулу для границ спектра.

9. Рассмотрена коррелированная модель Ллойда, в которой случайный потенциал получен путем сглаживания потенциала типа "белый шум." Для такой модели получено точное выражение для усредненной функции Грина и показано, что она независит от радиуса корреляции.

10. Для одномерных разупорядоченных моделей описываемых гамильтонианом (4) с взаимодействием ближайших соседей выведено замкнутое уравнение для совместной ста-

тистики опережающей и запаздывающей функций Грина. Получены общие формулы, связывающие указанную статистику с локализационными характеристиками случайной системы – критерием Андерсона и функцией участия. Для решения полученных уравнений для статистики разработана последовательная теория возмущений.

11. С помощью развитой теории возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина получены аналитические выражения для предельной при $t \rightarrow \infty$ плотности возбуждения на краевом узле (критерий Андерсона) для случая бинарного беспорядка с малой концентрацией дефектов и произвольной их энергией, а также для случая слаборазупорядоченной одномерной системы общего вида.

12. Введены функции участия, позволяющие судить о степени локализации состояний при заданной энергии. Для этих функций получены аналитические выражения для случая бинарного беспорядка с малой концентрацией дефектов и произвольной их энергией и для случая слаборазупорядоченной одномерной системы общего вида.

13. Произведено обобщение предложенной автором теории возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина на случай одномерной разупорядоченной цепочки со сложной структурной единицей. Показано, что в этом случае распределение степени локализации по спектру имеет существенно неоднородный характер – появляются области сильной делокализации, в центрах которых степень локализации демонстрирует резкие узкие максимумы.

14. Показано, что вычисление локализационных характеристик состояний одномерных разупорядоченных систем, основанное на теории возмущений для статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, возможно также для одномерных моделей, у которых функция распределения узельных энергий убывает настолько медленно, что все ее четные моменты (кроме нулевого) расходятся. С точки зрения стандартной квантовой механической теории возмущений такие модели являются непертурбативными. Предложенный в работе подход, основанный на статистике функций Грина, позволяет получить аналитические выражения для критерия Андерсона и функции участия и в этих случаях. В качестве примера в диссертации приведен анализ модели Ллойда.

15. Показано, что с помощью предложенного в диссертации метода построения совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, возможно вычис-

ление критерия Андерсона и функции участия для собственных состояний непрерывного (дифференциального, а не матричного) уравнения Шредингера с кусочно постоянным случайным потенциалом. Показано как эти величины связаны с естественно определенной длинной локализации волновых функций.

16. Показано, что метод построения совместной статистики функции Грина оказывается применим для исследования коррелированных низкоразмерных моделей. Для коррелированной цепочки с большим радиусом корреляции в диссертации рассчитан критерий Андерсона и спектральная зависимость степени локализации.

17. Предложен метод манипуляции диаграммным разложением функции Грина (метод следящих операторов), позволяющий контролируемым образом домножать подпоследовательности диаграмм с некоторым топологическим признаком на факторы, определяемые этим признаком.

18. Введена мера локализации состояний, представляющая собой число узлов N^* , накрываемых волновой функцией. Методом следящих операторов для N^* получено точное выражение для случая 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной цепочки.

Практически все полученные в работе результаты (кроме результатов 3 и 5, ориентированных на реальный эксперимент, и результата 6, имеющего методический характер) проверялись компьютерным моделированием, демонстрируя хорошее согласие.

Основные результаты, полученные в диссертационной работе, изложены в следующих опубликованных работах автора:

1. Козлов Г.Г. "Коррелированная модель Ллойда: точное решение" , Теоретическая и математическая физика, том 181, N°2, с. 312 -321, (2014).

2. Г.Г.Козлов, "Вычисление спектральной зависимости критерия локализации Андерсона в одномерной системе при коррелированном диагональном беспорядке", Теоретическая и математическая физика, Том 179, N°1, 134 - 144, (2014).

3. Г.Г. Козлов, "Спектральная зависимость степени локализации в одномерной разупорядоченной модели Ллойда", Теоретическая и математическая физика, 2012. - Т. 171, № 1. - С. 124-134.

4. G.G.Kozlov, "Spectral Dependence of the Degree of Localization in a 1D Disordered System with a Complex Structural Unit", Applied Mathematics, Vol. 2 No. 8, (2011).

5. Г.Г.Козлов, "Вычисление степени локализации в смысле критерия Андерсона для одномерной диагонально разупорядоченной системы", Теоретическая и математическая физика, т. 162, N°2, с. 286, (2010).

6. Г.Г.Козлов, "Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы с бинарным или равномерным диагональным беспорядком", Теоретическая и математическая физика, т. 140, N°2, с. 337, (2004).

7. Г.Г.Козлов, "Спектр поглощения одномерной цепочки с экситоном Френкеля при диагональном беспорядке в виде гиперболических дефектов", Теоретическая и математическая физика, т. 113, N°2, с. 331, (1997).

8. Г.Г.Козлов, "Рассеяние света назад конечной двумерной кристаллической пластинкой в области экситонного резонанса - антизеркальное отражение", Оптика и спектроскопия, т. 101, N°1, с.161, (2006).

9. Г.Г.Козлов, "Метод вычисления одноэкситонного спектра поглощения пространственно-ограниченных решеток", Оптика и спектроскопия, т. 82, N°2, с. 266, (1997).

10. Г.Г.Козлов, "Прохождение света через слоистую систему с экситонами Френкеля", Оптика и спектроскопия, т. 82, N°5, с. 839, (1997).

11. G.G.Kozlov, V.A.Malyshev, F.Dominguez-Adame, A.Rodriguez, "Zero-energy peak of the density of states and localization properties of a one-dimensional Frenkel exciton: Off-diagonal disorder", Phys.Rev. B **58**, Num 9, p 5367, (1998)

12. A.Rodriguez, F.Dominguez-Adame, G.G.Kozlov, V.A.Malyshev, "Density of states and localisation properties of a one-dimensional Frenkel Hamiltonian with off-diagonal disorder", Journal of Luminescence, **76 & 77**, p. 470 - 473, (1998).

0.11 Благодарности

Автор выражает благодарность В.А.Малышеву, который заинтересовал автора твердотельными разупорядоченными моделями, оказывал помощь при освоении материала, обсуждал и ставил задачи, исследованные в диссертации.

Как научный работник автор сформировался в 49-ой лаборатории Государственного Оптического Института им. С.И.Вавилова, сотрудникам которой В.С.Запасскому, В.В.Овсянкину и В.Г.Давыдову (ныне это сотрудники кафедры "Фотоника" СПбГУ) автор выражает благодарность за интерес к работе и помощь.

Существенную помощь при подготовке диссертации оказала финансовая поддержка со стороны ряда фондов и организаций. Автор признателен РФФИ и Российскому Министерству Образования и Науки (контракт № 11.G34.31.0067, руководитель А.В.Кавокин).

Автор благодарит ресурсный центр СПбГУ "Нанофотоника" за сотрудничество.

Литература

- [1] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Курс теоретической физики, том III, Квантовая механика*, Москва, "Наука", (1964).
- [2] Петрашень М.В., Трифонов Е.Д., *Применение теории групп в квантовой механике*, Москва (2002).
- [3] Дж. Займан, *Современная квантовая теория*, Москва "Мир", (1971).
- [4] Бете Г., Зоммерфельд А., *Электронная теория металлов*, пер. с нем., Л.- М.,(1938).
- [5] Киттель Ч., *Введение в физику твердого тела*, [пер. с англ.], 2 изд., М., 1963.
- [6] E. E. Jelley, *Nature*, (London) **38**, 1009, (1936).
- [7] G. Scheibe, *Angew. Chem.*, **50**, 212, (1937).
- [8] I.R. Peterson, *J. Phys. D* **23**, 4, (1990) 379–95.
- [9] I.R. Peterson, in Т.Н. Richardson, Ed., *Functional Organic and Polymeric Materials*, Wiley: NY (2000).
- [10] L.S. Miller, D.E. Hookes, P.J. Travers and A.P. Murphy, *J. Phys. E* **21**, 163–167, (1988).
- [11] Е.В.Стукова, С.В.Барышников, А.Ю.Милинский, *Физика малых частиц и наноструктурных материалов*, Благовещенск, Издательство АмГУ (2010).
- [12] С.И.Пекар, *ЖЭТФ*, т.33, в.4 с. 1022, (1957).
- [13] С.И.Пекар, *Кристаллооптика и добавочные световые волны*, Киев: "Наукова думка", (1982).

- [14] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Курс теоретической физики, том V, Статистическая физика*, Москва, "Наука", (1964).
- [15] А.С.Давыдов, *Теория твердого тела*, Издательство "Наука", Москва (1976).
- [16] P.Lloyd, J.Phys.C: Solid State Phys., V.2, p.1717, (1969).
- [17] Frenkel J., Phys. Rev., **37**, No 1, p. 37, (1931);
- [18] Давыдов А. С., *Теории молекулярных экситонов*, М., (1968)
- [19] И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, *Введение в теорию неупорядоченных систем*, Москва "Наука", (1982).
- [20] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and N. M. Makarov, arXiv:1110.1762v1 [cond-mat.dis-nn]
- [21] F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and N. M. Makarov, Physics Reports, 512, 125–254, (2012).
- [22] M. Titov and H. Schomerus, Phys.Rev.Lett., **95**, 126602, (2005).
- [23] L.I. Deych, M.V. Erementchouk, A.A. Lisyansky, Physica B, **338**, 79-81, (2003).
- [24] F.J.Dyson, Phys.Rev. **92**, p.1331, (1953).
- [25] Onodera Y, Toyozawa Y. J.Phys. Soc. Jap., v.24, p. 341, (1968).
- [26] C.R.Gochanour, H.C.Anderson, M.D.Fayer, J.Chem.Phys., **70**(9), p. 4254, (1979).
- [27] В.И.Смирнов, *Курс высшей математики*, т.3, М.: "Наука", с.347, (1974).
- [28] H. Schmidt, Phys.Rev., **105**, p. 425, (1957).
- [29] Белоусов М.В., Погарев Д.Е., Письма в ЖЭТФ, т. 36, в.5, с. 189-191, (1982).
- [30] Белоусов М.В., Вольф Б.Е и Иванова Е.А., Письма в ЖЭТФ, т. 38, в. 8, с. 456, (1983).
- [31] Anderson P.W., Phys.Rev., **109**, p. 1492, (1958).
- [32] A.V.Malyshev, V.A.Malyshev and F.Dominguez-Adame, arXiv:cond-mat/0303092.
- [33] Г.Г.Козлов, arXiv:0803.1920. [math-ph]

- [34] R. de L.Kronig and W.Penny, Proc. Roy. Soc. **130**, p. 499, (1931).
- [35] Ising E., Z.Physik, **31** ,253, (1925).
- [36] Березинский В.Л., ЖЭТФ, **65**, с. 1251, (1973).
- [37] Гоголин А.А., Мельников В.И., Рашба Э.И., ЖЭТФ, **69**, с. 327, (1975).
- [38] Гоголин А.А., Мельников В.И., Рашба Э.И., ЖЭТФ, **72**, с. 629, (1977).
- [39] Гоголин А.А., Золотухин С.П., Мельников В.И. и др., Письма в ЖЭТФ, **22**, с. 564, (1975).
- [40] Бычков Ю.А., ЖЭТФ, **65**, с. 427, (1972).
- [41] Козлов Г.Г., Теоретическая и математическая физика, **162**, N°2, с. 285, (2010).
- [42] Г.Г.Козлов, Теоретическая и математическая физика, **179**, N°1, 134 - 144, (2014).
- [43] G.Theodorou, M.H.Cohen, Phys.Rev. B **13**, 4597, (1976).
- [44] A. Rodriguez, V. A. Malyshev, G. Sierra, M. A. Martin-Delgado, J. Rodriguez-Laguna, and F. Dominguez-Adame, Phys.Rev.Lett., **90**, 027404-1 - 027404-4, (2003).
- [45] V. A. Malyshev, A. Rodrigues, F. Domingues-Adame, Phys.Rev. B, **60**, 14140 - 14146, (1999).
- [46] M. Titov and H. Schomerus, Phys.Rev.Lett., **91**, 176601-1 - 176601-4, (2003).
- [47] D. J. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys., **16**, L929, (1983).
- [48] A. MacKinnon, J. Phys. C: Solid State Phys., **17**, L289, (1984).
- [49] D. E. Rodrigues, H. M. Pastawski, and J. F. Weisz, Phys.Rev. B, **34**, 8545 - 8549, (1986).
- [50] Shmuel Fishman, R. E. Prange, Meir Griniasty, Phys.Rev. A, **39**, 1628 - 1633, (1989).
- [51] Lev I. Deych, A. A. Lisyansky, and B. L. Altshuler, Phys.Rev.Lett., **84**:12, 2678 - 2681, (2000).
- [52] Г.Г.Козлов, Applied Mathematics, **2**, No. 8, (2011).

- [53] V.A. Malyshev, A. Rodriguez, F. Dominguez-Adame, Phys.Rev. B, **60**, p. 14140, (1999).
- [54] Francisco A.B.F. de Moura and Marcelo L. Lyra, Phys.Rev.Lett., **81**, p. 3735, (1998).
- [55] David H. Danlap, H-L. Wu, and Philip W. Phillips, Phys.Rev.Lett., **65**, p. 88, (1990).
- [56] Г.Г. Козлов, Теоретическая и математическая физика. **171**, № 1. - с. 124-134 (2012).
- [57] Бодунов Е.Н., Оптика и Спектроскопия, **84**, №3, с. 405 – 430, (1998).
- [58] E.N. Bodunov, M.N. Berberan-Santos, E.J. Nunes Pereira, J.M.G. Martinho, Chemical Physics, **259**, p. 49 – 61, (2000).
- [59] N. T. Bagraev, A. I. Gusarov, and V. A. Mashkov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **92**, 968-987, (1987).
- [60] Баграев Н.Т., Гусаров А.И., Машков В.А., ЖЭТФ, **95**, вып.4, с. 1412-1429, (1989).
- [61] G.G.Kozlov, arXiv:1105.2678. [cond-mat.dis-nn]
- [62] Г.Г.Козлов, Оптика и спектроскопия, **101**, №1, с.161, (2006).
- [63] Г.Г.Козлов, Теоретическая и математическая физика, **113**, №2, с. 331, (1997).
- [64] Г.Г.Козлов, Оптика и спектроскопия, **82**, №2, с. 266, (1997).
- [65] Г.Г.Козлов, Оптика и спектроскопия, **82**, №5, с. 839, (1997).
- [66] Г.Г.Козлов, Теоретическая и математическая физика, **140**, №2, с. 337, (2004).
- [67] Козлов Г.Г., Теоретическая и математическая физика, **181**, №2, с. 312 -321, (2014).
- [68] G.G.Kozlov, arXiv: cond-mat 9909335.
- [69] A.Rodriguez, F.Dominguez-Adame, G.G.Kozlov, V.A.Malyshev, Journal of Luminescence, **76 & 77**, p. 470 - 473, (1998).
- [70] G.G.Kozlov, V.A.Malyshev, F.Dominguez-Adame, A.Rodriguez, Phys.Rev. B, **58**, Num 9, p. 5367, (1998).

- [71] A. Eisfeld, S.M. Vlaming, V.A.Malyshev, and J. Knoester, Phys.Rev.Lett., **105**, p. 137402, (2010).
- [72] A. Croy, P. Cain, and M. Schreiber, The European Physical Journal B, **82**, 107-112, (2011).
- [73] V.A. Malyshev, A. Rodriguez, F. Dominguez-Adame, Phys.Rev. B, **60**, p. 14140, (1999).
- [74] Francisco A.B.F. de Moura and Marcelo L. Lyra, Phys.Rev.Lett., **81**, p. 3735, (1998).
- [75] Б.М.Миллер, А.Р.Панков, *Теория случайных процессов в примерах и задачах*, М.: ФИЗМАТЛИТ, (2002).
- [76] Е.С.Вентцель, Л.А.Овчаров, *Теория случайных процессов и ее инженерное приложение*, Москва "Высшая школа", (2000).
- [77] F. C. Spano and J. Knoester, in Advances in Magnetic and Optical Resonance, Vol. 18, ed. W. S. Warren (Academic, New York, p. 117, (1994).
- [78] Contributions in Adv. Mater. 7, 435-512 (1995).
- [79] *J-aggregates*, ed. T. Kobayashi, World Scientific, Singapore, (1996).
- [80] *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Hardcover – February, by E. L. Ivchenko, (2005).
- [81] K. Henneberger, Phys. Rev. Lett. **83**, 1265, (1999).
- [82] K. Henneberger Phys. Rev. Lett. **80**, 2889 (1998)
- [83] Roland Zeyher, Joseph L. Birman, and Wilhelm Brenig, Phys. Rev. B **6**, 4613, (1972).
- [84] C.S. Ting M.J. Frankel J.L. Birman, Solid State Communications, **17**, Issue 10, p. 1285-1289, (1975).
- [85] Peter Y. Yu and F. Evangelisti, Phys. Rev. Lett. **42**, 1642 (1979)
- [86] Г. Г. Козлов, В. С. Запасский, В. В. Овсянкин, Оптика и Спектроскопия, **110**, № 3, с. 492–499, (2011).

- [87] F. M. Ismagilov and Yu. A. Kravtsov, *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii, Radiofizika*, **35**, No. 8, pp. 671-677, (1992).
- [88] Langbein W., Runge E., Savona V., Zimmermann R., *Phys. Rev. Lett.* **89**, p. 157401, (2002).
- [89] Savona V., Runge E., Zimmermann R., *Phys. Rev. B.* **62**, p. R4805–R4808, (2000).
- [90] Кособукин В.А., *ФТТ*, **41**, В.2, с.330-336, (1999)
- [91] Кособукин В.А., Селькин А.В. *ФТТ*, **42**, В.10, с.1863-1868, (2000)
- [92] Федер Е., *Фракталы*, М: «Мир», 1991.
- [93] А. А. Кириллов, *Повесть о двух фракталах*, Летняя школа «Современная математика». — Дубна, (2007).
- [94] I. Webman and J. Klafter, *Phys. Rev. B* **26**, 5950, (1982)
- [95] P. Soven. *Phys. Rev.*, 156, 609, (1967).
- [96] B. Velicky, S. Kirpatrick, H. Ehrenreich. *Phys. Rev.*, 175, 747, (1968).
- [97] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, P. L. Leath. *Rev. Mod. Phys.*, 46, 465, (1974).
- [98] Мотт Н., Дэвис Е., *Электронные процессы в некристаллических веществах* — М.: Мир, (1974).
- [99] И.Я.Гольдшейд, С.А.Молчанов, Л.А.Пастур, *Функц. анализ и его прил.*, **11**, вып. 1, 1–10, (1977).
- [100] N.C.Murphy, R.Wortis, and W.A.Atkinson, *Physical Review B* **83**, 184206 (2011).
- [101] E. Cuevas, arXiv:cond-mat/0204197v2 [cond-mat.dis-nn] 11 Dec (2002).
- [102] Белавин А.А., Кулаков А.Г., Усманов Р.А. *Лекции по теоретической физике* — М.: МЦНМО, 224 с. — ISBN 5-900916-91-X, (2001).
- [103] Бэкстер Р. *Точно решаемые модели в статистической механике* — М.: Мир, (1985).
- [104] Хайкин С. *Нейронные сети: полный курс* — М.: Издательский дом "Вильямс (2006).

- [105] Hermann R. (ed.), *Ricci and Levi-Civita's tensor analysis papers*, Math Sci Press, Brookline (определение символа — см. стр. 31), (1975).
- [106] Charles W. Misner, Kip S. Thorne, John Archibald Wheeler, *Gravitation*, (1970) W.H. Freeman, New York; ISBN 0-7167-0344-0. (См. параграф 3.5 для обзора применения тензоров в общей теории относительности). Русский перевод: Ч. Мизнер, К. Торн, Дж. Уилер, *Гравитация*, Москва, «Мир», (1977) (См. по указателю — Леви-Чивиты тензор).
- [107] Димитриенко Ю.И., *Тензорное исчисление*, М.:Высшая школа, 575 с, (2001).
- [108] Э.Гурса, *Курс математического анализа*, т. 2, Гостехиздат, (1933).
- [109] Ш.Е.Цимринг, *Специальные функции и определенные интегралы. Алгоритмы. Программы для микрокалькуляторов: Справочник*, — М.: Радио и связь, (1988).
- [110] Ibrahim Avgin, David L. Huber, *Physical Review B*, **60**, No 10, 7646, (1999).
- [111] L. Fleishman, D.C. Licciardello, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, L125, (1977).
- [112] H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **72**, 174207, (2005).