САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи
УДК 538.94

Козлов Глеб Геннадьевич

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭКСИТОНОВ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ТРАНСЛЯЦИОННО-НЕСИММЕТРИЧНЫХ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МОДЕЛЯХ МЕТОДОМ ФУНКЦИЙ ГРИНА

Специальность 01.04.02 — теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Автореферат

Санкт-Петербург
2011

Работа выполнена в Санкт-Петербургском Государственном университете

Официальные оппоненты:

Доктор физико-математических наук, профессор Машков Владимир Александрович

Доктор физико-математических наук, профессор Бодунов Евгений Николаевич

Доктор физико-математических наук, ...

Ведущая организация: Российский Государственный Педагогический Университет им. А.И. Герцена, ГОУ ВПО.

Защита состоится ... г. в ... час. на заседании диссертационного совета ... по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора наук при Санкт-Петербургском Государственном университете по адресу: 198504 Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская 1, конференц-зал НИИ физики им В. А. Фока.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке им. М. Горького СПбГУ.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенных печатью, просим направлять по вышеуказанному адресу ученому секретарю диссертационного совета.

Автореферат разослан ... г.

Ученый секретарь диссертационного совета, профессор ...

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы.

Большинство математических моделей современной физики твердого тела строятся на основе экспериментально наблюдаемой у многих конденсированных систем трансляционной симметрии. Наличие этой симметрии дает возможность использовать теорему Блоха при анализе соответствующих математических моделей, что, в свою очередь, позволяет существенно упростить, а иногда и решить целый ряд задач физики твердого тела. Несмотря на то, что трансляционная симметрия является типичной для твердотельных моделей, нередки случаи, когда для описания конденсированных физических систем требуется построение математических моделей, которые такой симметрией не обладают. Для анализа подобных моделей в настоящее время не существует универсального подхода (подобного подходу, основанному на теореме Блоха), поэтому изучение трансляционно-несимметричных твердотельных моделей вызывает целый ряд трудностей математического и методического характера. Простейшие модели этого типа 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 применяются 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. Теплоемкость и спектр оптической восприимчивости таких систем в значительной степени отличаются от соответствующих удельных величин бесконечных систем и нарушение трансляционной симметрии, связанное с конечностью этих объектов, должно быть учтено при построении математических моделей для их описания.

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.

По мнению автора, наука о трансляционно-несимметричных системах в настоящее время находится в стадии накопления информации (особенно это относится к теории разупорядоченных систем), когда достаточно убедительный математический анализ конкретных примеров даже простейших моделей представляется ценным и актуальным. Примеры подобных моделей описываются в данной диссертационной работе.

Цели и задачи работы.

Целью данной диссертационной работы являлось исследование класса математических моделей твердотельных трансляционно-несимметричных систем, описывающихся гамильтонианом, имеющим в узельном представлении следующую матрицу:

$$\langle \mathbf{r}|H|\mathbf{r}'\rangle = H_{\mathbf{rr}'} = \delta_{\mathbf{rr}'}\varepsilon_{\mathbf{r}} + w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'} \tag{1}$$

Такая матрица соответствует экситону Френкеля, в системе двухуровневых атомов, расположенных в узлах $\mathbf{r}$ правильной решетки и имеющих расщепление уровней $\varepsilon_{\mathbf{r}}$, причем отсутствие трансляционной симметрии выражается в неоднородности диагональных элементов $\varepsilon_{\mathbf{r}}$, а причиной движения экситона является межатомное взаимодействие $w_{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}$. Матрицы такого типа возникают при моделировании колебаний ядер в изотопически неоднородных кристаллах, при описание электронного движения в твердых телах, при рассмотрении распространения электромагнитных волн в слоистых системах и длинных линиях с сосредоточенными параметрами и др. Исследование спектра и характера собственных векторов таких матриц дает информацию о всех перчисленных моделях. Неоднородность величин $\varepsilon_{\mathbf{r}}$ позволяет рассмотреть эти модели при отсутствие трансляционной симметрии, а получение математически убедительных результатов для конкретных моделей позволяет накопить информацию о трансляционно-несимметричных системах в целом, что и являлось целью данной диссертационной работы.

Для достижения этой цели решались следующие задачи.

– Обоснование целесообразности анализа гамильтониана (1), который дает конкретную информацию (качественного, а иногда и количественного характера) о широком классе твердотельных моделей, описывающих экситонное, электронное и колебательное движения в твердых телах при отсутствии трансляционной симметрии.

– Обоснование применения для указанного анализа аппарата функций Грина, который в ряде случаев позволяет непосредственно получать важнейшие характеристики изучаемой модели (плотность состояний и линейную восприимчивость), минуя решение спектральной задачи для матрицы типа (1).

– Обобщение предложенного Дайсоном метода анализа случайных матриц типа (1) на случай моделей с неограниченным спектром и точное решение задачи Ллойда, иллюстрирующее эффективность разработанного обобщения.

– Разработка метода расчета длинноволновых компонент функции Грина гамильтониана (1), описывающих спектр поглощения и нелокальную восприимчивость и позволяющего получить эти характеристики модели без решения спектральной задачи для матрицы (1) (метод дифференциального уравнения).

– Постановка и решение электродинамической задачи об отражение и пропускание света плоской пластинкой с нелокальным характером восприимчивости. Формулировка условий для нахождения амплитуды добавочной волны Пекара.

– Развитие метода Дайсона для анализа одномерных диагонально неупорядоченных моделей с гамильтонианом (1) с взаимодействием ближайшего соседа. Расчет статистики краевой функции Грина для случаев бинарного и однородного беспорядков.

– Развитие метода Дайсона для определения динамики распада возбуждения, первоначально локализованного на краевом узле случайной системы. Формулировка уравнения для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина гамильтониана (1). Построение последовательной теории возмущений для его решения.

– Разработка матричного метода решения уравнения для совместной статистики функций Грина, позволяющего проанализировать модели со слабоубывающими функциями распределения узельных энергий (не имеющих конечных четных моментов выше нулевого). Расчет локализационных характеристик модели Ллойда.

– Обобщение развитого в диссертации метода анализа локализационных свойств низкоразмерных случайных *дискретных* моделей на случай *непрерывной* модели, основанной на дифференциальном уравнении Шредингера с кусочно-постоянным случайным потенциалом.

– Обобщение предложенного в диссертации метода совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина на случай коррелированных одномерных моделей. Построение теории возмущений по обратному радиусу корреляции.

– Развитие метода манипуляции диаграммным разложением функций Грина гамильтониана (1), позволяющего контролируемым образом домножать подпоследовательности диаграмм на факторы, несущие информацию о топологии диаграммы и об узлах, через которые она проходит.

Научная новизна и практическая значимость работы.

– Впервые произведено обобщение метода Дайсона на случай систем с неограниченным спектром, когда невозможно аналитическое продолжение усредненных величин на область спектра Гамильтониана (1).

– Впервые предложен метод дифференциального уравнения для компонент функции Грина, определяющих спектр поглощения модельной системы, описывающейся гамильтонианом (1), позволяющий расчитать этот спектр в случаях, когда решение спектральной задачи для матрицы (1) невозможно.

– Показано, что в рамках развитого метода дифференциального уравнения для функции Грина, система материальных уравнений для нелокальной восприимчивости и уравнений Максвелла может быть точно решена, причем типичная для задач подобного типа трудность, связанная с определением амплитуды добавочной волны Пекара, не возникает.

– Впервые предложен и описан эффект антизеркального отражения от двумерной полосы с экситонным характером оптического возбуждения.

– Впервые предложена модель разупорядоченной одномерной системы (набор гиперболических дефектов), допускающая точное вычисление спектра поглощения предложенным в диссертации методом диференциального уравнения для функции Грина.

– Впервые изучена статистика краевой функции Грина *бинарно разупорядоченной* одномерной цепочки с взаимодействием ближайших соседей. При этом установлен фрактальный характер этой статистики и предложен точный алгоритм ее получения. Предложенный алгоритм допускает возможность аналитического продолжения усредненных величин на область спектра соответствующего случайного гамильтониана (1), что позволяет вычислять усредненную плотность состояний последнего и усредненную плотность возбуждения на краевом узле.

– Изучена статистика краевой функции Грина *равномерно разупорядоченной* одномерной цепочки с взаимодействием ближайших соседей. Впервые показано, что на некотором (указанном явно) интервале для указанной статистики возможно получить точное аналитическое выражение. Показано, что в дополнительной области статистика может быть вычислена с помощью предложенной в диссертации эффективной процедуры, позволяющей получить для усредненной краевой функции Грина замкнутое трансцедентное уравнение, а для границ энергетического спектра – аналитическую формулу.

– Впервые произведено обобщение метода Дайсона на случай совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина гамильтониана (1) с взаимодействием ближайших соседей. При этом для совместной статистики получено замкнутое уравнение. Показано, что для требующегося в приложениях случая предельно малых мнимых частей энергетических аргументов, это уравнение может быть значительно упрощено. Для решения этого упрощенного уравнения развита теория возмущений, использующая предложенную и (по сведениям автора) неизвестную в математике систему специальных функций.

– Впервые получены аналитические формулы для предельной при $t \to \infty$ плотности возбуждения D на краевом узле (критерий Андерсона)[5] для случая бинарно разупорядоченной цепочки, описываемой гамильтонианом (1) с взаимодействием ближайших соседей при произвольной энергии дефекта и малой их концентрации. При этом обнаружен неаналитический характер зависимости D от энергии дефектов.

– Впервые получены аналитические формулы для критерия Андерсона для слабо разупорядоченной цепочки общего вида, описываемой гамильтонианом (1) с взаимодействием ближайших соседей.

– Введены *функции участия*, позволяющие судить о степени локализации собственных векторов (1) в различных местах энергетического спектра. Для упомянутых выше типов беспорядков для этих функций впервые получены аналитические выражения.

– Впервые вычислена функция участия и критерий Андерсона для случая разупорядоченной одномерной цепочки со сложной структурной единицей, ввиде фрагмента, состоящего из m связанных между собой одинаковых двухуровневых систем.

– Впервые вычислены критерий Андерсона и функция участия для одномерных моделей со слабоубывающими функциями распределения узельных энергий.

– На основе предложенного в диссертации метода вычисления совместной статистики функций Грина для коррелированных систем, впервые получены аналитические формулы для локализационных характеристик таких систем.

– Предложен метод манипуляции диаграммным разложением функции Грина матриц вида (1) – метод *следящих операторов*– позволяющий домножать диаграммы на величины, связанные с топологией диаграммы и положением узлов, через которые она проходит.

– Предложена и изучена мера локализации собственных векторов случайных матриц, представляющая собой среднее количество узлов „накрываемых“ состоянием $\langle\langle N^* \rangle\rangle$. Предложенным в диссертации методом следящих операторов впервые получена точная формула для $\langle\langle N^* \rangle\rangle$ для случая 0-сотояния одномерной недиагонально разупорядоченной цепочки.

Положения, выносимые на защиту.

1. Процедура вычисления спектра поглощения модельных трансляционно-несимметричных экситонных систем (пространственно ограниченных, разупорядоченых), описываемых гамильтонианом (1), может быть сведена к анализу полученного в диссертационной работе дифференциального уравнения, может быть точно решено в тех случаях, когда прямая диагонализация матрицы (1) невозможна.

2. Вычисление нелокальной восприимчивости модельной ограниченной системы, описываемой гамильтонианом с матрицей вида (1), возможно свести к решению дифференциального уравнения для некоторой вспомогательной функции, через которую выражаются необходимые для решения этой задачи компоненты функции Грина. В рамках этой процедуры возможно точное решение нелокальных уравнений Максвелла, причем необходимые уравнения для амплитуд добавочных волн Пекара последовательно возникают в ходе расчета.

3. Форма спектра поглощения модельной разупорядоченной системы, описываемой гамильтонианом (1) при наличии произвольного числа гиперболических дефектов, оказывается независящей от числа и взаимного расположения дефектов и определяется только суммой их амплитуд.

4. Метод анализа матриц типа (1), предложенный Дайсоном и ориентированный на случай конечного или полубесконечного спектра допускает обобщение на случай бесконечного спектра. При этом уравнение Дайсона для статистики функции Грина сохраняет свой вид, однако процедура получения усредненных функций Грина должна быть существенно изменена. Конкретный рецепт вычисления указанных средних формулируется в диссертационной работе.

5. Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы, описываемой матрицей (1) с взаимодействием ближайших соседей, при наличии бинарного беспорядка имеет фрактальный характер, причем алгоритм построения этой статистики может быть сформулирован в замкнутом виде. Указанный алгоритм допускает возможность аналитического продолжения полученных с его помощью усредненных функций Грина на область спектра и вычисление усредненной плотности состояний соответствующей случайной матрицы вида (1).

6. Для равномерно разупорядоченной системы, описываемой гамильтонианом (1) с

взаимодействием ближайших соседей, можно указать интервал, где статистика краевой функции Грина вычислятся в аналитическом виде. В дополнительном интервале значений аргумента статистика краевой функции Грина может быть построена с помощью описанной в диссертационной работе последовательной процедуры, причем для усредненной краевой функции Грина может быть получено замкнутое трансцедентное уравнение, а для границ спектра задачи – аналитическая формула.

7. Метод Дайсона, первоначально предложенный для расчета усредненной функции Грина случайных цепочек, может быть обобщен на случай двух функций Грина (опережающей и запаздывающей), причем для совместной статистики этих функций может быть получено замкнутое уравнение. Для актуального случая предельно малых мнимых частей энергетических аргументов опережающей и запаздывающей функций Грина это уравнение может быть существенно упрощено, причем задача сводится к исследованию совместной статистики двух вещественных случайных величин, а не двух комплексных, как это имеет место на исходном этапе задачи.

8. Для сформулированного в диссертации уравнения, определяющего совместную статистику опережающей и запаздывающей функции Грина, возможно построить теорию возмущений, причем выбор малого параметра может быть неоднозначен и определяться конкретной задачей.

9. Предельная при $t \to \infty$ усредненная плотность возбуждения на краевом узле D (критерий Андерсона) может быть последовательно рассчитана по теории возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функции Грина, причем играет роль только сингулярный (по разности энергетических аргументов) вклад в эту статистику.

10. Предельная при $t \to \infty$ усредненная плотность возбуждения на краевом узле D для случая бинарно разупорядоченной системы характеризуется (при малой концентрации дефектов) неаналитической зависимостью от энергии дефекта.

11. Для бинарно разупорядоченной модельной системы с гамильтонианом (1) функция участия (определяющая степень локализации состояний в зависимости от энергии) демонстрирует появление "поверхностного"состояния при энергии дефекта, превосходящей пороговую (указанную в диссертации) величину.

12. Предельная при $t \to \infty$ усредненная плотность возбуждения на краевом узле D для слаборазупорядоченной системы, описываемой случайной матрицей (1) с взаимодействием ближайших соседей, определяется только вторым моментом функции распределения узельных энергий (в случае когда указаный момент конечен).

13. Спектральное поведение степени локализации в разупорядоченной одномерной системе со сложной структурной единицей может быть существенно неоднородным. Характер неоднородности качественно отличается от такового для классической системы с элементарной структурной единицей и представляет собой участки слабой локализации с острыми максимумами степени локализации в центрах этих участков.

14. Предложенный в диссертации метод вычисления локализационных характеристик одномерных разупорядоченных дискретных моделей может быть обобщен на случай непрерывных моделей с кусочно постоянным случайным потенциалом.

15. Для класса моделей с функцией распределения узельных энергий, не имеющей конечных четных моментов выше нулевого, зависимость локализационных характеристик от параметра разупорядочения (ширины функции распределения узельных энергий) может радикально отличаться от присущей моделям с быстроубывающей статистикой узельных энергий квадратичной зависимости. В частности для модели Ллойда указанная зависимость оказывается линейной.

16. Предложенный в диссертации метод совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина позволяет расчитывать локализационные характеристики коррелированных случайных цепочек при больших радиусах корреляции и значительной величине беспорядка. Спектральная зависимость локализационных характеристик значительно отличается от таковой для некоррелированных случайных цепочек.

17. Замена матричных элементов в (1) на специально построенные *следящие* операторы позволяет контролируемым образом модифицировать диаграммное разложение соответствующих функций Грина, домножая входящие в нее подпоследовательности диаграмм на факторы, несущие информацию о топологии диаграмм и узлах, через которые она проходит.

18. Нестационарный случайный процесс, возникающий при построении 0-состояния недиагонально разупорядоченной цепочки, может быть проанализирован методом следящих операторов на предмет степени локализации. Точный расчет среднего количества узлов, накрываемых волновой функцией 0-состояния, показывает, что это состояние локализовано, вопреки утверждениям [6].

Апробация работы.

Основные результаты, вошедшие в диссертационную работу, опубликованы в рецензируемых российских и зарубежных журналах. Список публикаций приведен в конце реферата.

Результаты, представленные в работе докладывались на научных семинарах

– в НИИ Физики им. В.А.Фока при Санкт-Петербургском университете,

– в Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе,

– в Санкт-Петербургском Отделение математического института (ПОМИ) им. В.А.Стеклова.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из Введения, 9-ти глав, Заключения и Списка цитируемой литературы, включающего 55 наименования. Общий объем диссертации (без списка литературы) составляет 214 страниц, включая 28 рисунков.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **Введении** кратко изложены причины значительного интереса к разупорядоченным системам и описывающим их математическим моделям. Приводятся примеры задач, возникающих при изучении таких систем, при этом подчеркивается, что в настоящее время наука о разупорядоченных системах находится в стадии накопления материала, что заставляет обратиться к изучению разупорядоченных вариантов предельно упрощенных классических задач физики твердого тела. Приводятся аргументы показывающие удобство и самоценность метода функций Грина при анализе трансляционно-несимметричных твердотельных моделей.

Глава 1. ОБЗОРНАЯ ЧАСТЬ

В этой главе приводятся 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 (подраздел 0.1.1) и спектром поглощения (подраздел 0.1.2), выражение через эти функции временной динамики плотности возбуждения, первоначально локализованного в точке (подраздел 0.1.3) и уравнение Дайсона в теории возмущений для функций Грина (подраздел 0.1.4).

Во-вторых, в этой главе описываются результаты, полученные в работах Ллойда[2] (подраздел 0.1.5) и Дайсона[3] (подразделы 0.1.6 и 0.1.7), имеющие непосредственное отношение к предмету исследования данной диссертационной работы и использованные автором в оригинальной части.

Наконец, в заключение этой обзорной главы (подраздел 0.1.8) описано проведенное автором оригинальное исследование, касающееся связи моделей Дайсона и Ллойда. При этом 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 привели его в обзорной части диссертационной работы.

Глава 2. 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 (1) имеет соответствующим образом построенные диагональные элементы (формула (6) диссертационной работы).

Первый подраздел второй главы (подраздел 0.2.1) посвящен разработке метода расчета спектра поглощения пространственно ограниченных систем. Отправным пунктом в этих случаях является формула (34) диссертационной работы. Для фигурирующей в ней функции Грина получается дифференциальное уравнение, которое в ряде простых (но не тривиальных с точки зрения анализа соответствующей матрицы (1)) случаев может быть решено точно. Результаты, полученные в этих разделах, проверялись прямым компьютерным экспериментом, обнаруживая полное согласие (Рис.1).

В следующем подразделе (подраздел 0.2.2) 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 подразделе (подраздел 0.2.3) с помощью развитой методики расчета восприимчивости ограниченных систем анализируется предложенный автором эффект антизеркального отражения от кристаллической квазидвумерной полосы (квантовой ямы) с экситонным характером возбуждений (Рис.2).

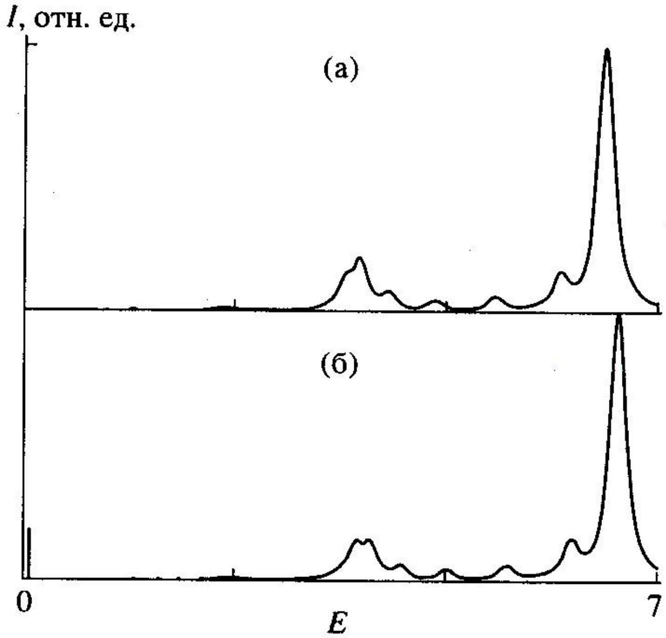

Рис. 1: Спектр поглощения цепочки со скачком начального расщепления. (а) – метод численной диагонализации, (б) – теоретический расчет

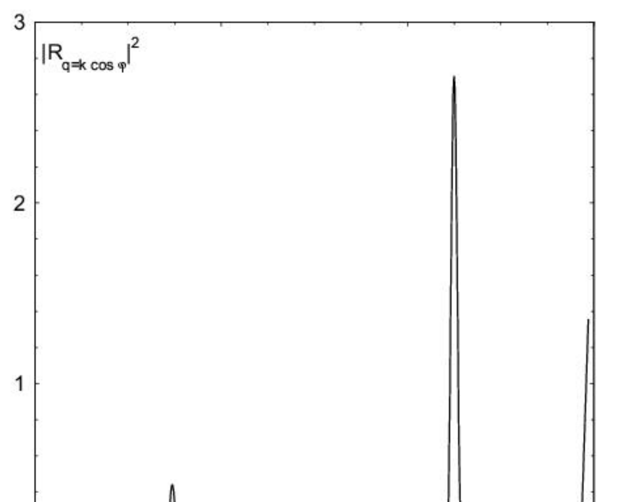

Рис. 2: Угловая зависимость рассеяния в верхнее полупростанство плоской полосой с экситоном. Расчет производился для падающей под углом 45^0 плоской монохроматической волны. Наряду с зеркальным отражением под углом 135^0, возникает рассеяние назад – максимум при углах рассеяния $\sim 45^0$.

Глава 3. РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ОДНОМЕРНЫЕ МОДЕЛИ. СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ И ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ. СТАТИСТИКА ФУНКЦИИ ГРИНА.

В этой главе диссертационной работы приводятся результаты автора, касающиеся *разупорядоченных моделей*, описываемых экситонным гамильтонианом с матрицей (1). Все результаты диссертации, касающиеся моделей этого типа, относятся к *одномерным* системам, для которых возможен наиболее глубокий анализ.

Во вводной части диссертации отмечается, что изучение неупорядоченных моделей вызывает наибольшие трудности, поскольку в этом случае все интересующие нас величины, связанные с матрицей (1), 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 первом подразделе третьей главы диссертации (подраздел 0.3.1) 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 (1) 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 следующем подразделе (подраздел 0.3.2) данной главы исследуются классические модели одномерных неупорядоченных систем, когда диагональные элементы ε_r матрицы (1) считаются независимыми случайными величинами с функцией распределения, соответствующей *бинарному* или *равномерному* типам диагонального беспорядка. При этом мы следуем работе Дайсона [3], 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 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 (1).

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 некотром (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 трансцедентное уравнение, а для границ спектра равномерно неупорядоченной системы – аналитическая формула.

Все полученные результаты проверяются сопоставлением с компьютерными экспериментами.

Глава 4. ВЫЧИСЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В СМЫСЛЕ КРИТЕРИЯ АНДЕРСОНА ДЛЯ ОДНОМЕРНОЙ ДИАГОНАЛЬНО РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ.

В этой главе изучается классическая для теории разупорядоченных систем задача о распаде возбуждения, первоначально локализованного в точке. Базовый модельный гамильтониан (матрица типа (1)) $\mathbf{H}$ имеет следующие элементы:

$$H_{r,r'} = \delta_{r,r'}\varepsilon_r + \delta_{r,r'+1} + \delta_{r,r'-1}, \qquad r, r' = 1, ..., N, \tag{2}$$

причем подразумевается термодинамический предел $N \to \infty$. Равные единице недиагональные элементы матрицы (2) задают масштаб измерения энергии.

Для такой модели рассмотривается следующая задача. Пусть при $t = 0$ крайний атом ($r = N$) был возбужден и требуется найти вероятность D того, что этот атом останется в возбужденном состояние при $t \to \infty$. Математически это означает, что начальное состояние системы описывается волновой функцией (вектором-столбцом) $\mathbf{\Psi}(0)$ с компонентами $\Psi_r(0) = \delta_{r,N}$, и требуется найти $D = \langle|\Psi_N(t \to \infty)|^2\rangle$, причем угловые скобки обозначают усреднение по реализациям случайных расщеплений ε_r, $r = 1, ..., N$. Зависимость волновой функции системы от времени определяется следующим образом: $\mathbf{\Psi}(t) = \exp\Big(\imath\mathbf{H}t\Big)\mathbf{\Psi}(0)$.

Отсюда следует, что интересующая нас величина D может быть выражена через собственные векторы $\mathbf{\Psi}^\lambda$ и собственные числа $E_\lambda, \lambda = 1, ..., N$ матрицы (2) следующим образом:

$$D = \langle |\Psi_N(t \to \infty)|^2 \rangle = \lim_{t\to\infty} \left\langle \sum_{\lambda\lambda'} |\Psi_N^\lambda|^2 |\Psi_N^{\lambda'}|^2 \exp \imath (E_\lambda - E_{\lambda'}) t \right\rangle = \left\langle \sum_\lambda |\Psi_N^\lambda|^4 \right\rangle \qquad (3)$$

Величина D называется критерием Андерсона и конечность этой величины свидетельствует о том, что среди собственных функций гамильтониана (2) есть локализованные.

Для оценки степени локализации собственных векторов (2) в спектральном интервале $[U, U + dU]$, вводится функция "участия"$W(U)$, определяемая следующим соотношением:

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

Очевидно $D = \int W(U)dU$. Смысл функции участия заключается в том, 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 (4) дает количественную информацию о средней величине собственных векторов случайной матрицы (2) на крайнем узле в спектральном интервале $[U, U + dU]$. С помощью современных персональных компьютеров возможно за обозримое время проводить диагонализацию матриц (2) и в таком численном эксперименте "наблюдать"величины (3) и (4) при $N \sim 1000$ и более. Основной задачей, исследуемой в данной главе диссертации (а также в 4 следующих главах), является теоретический расчет этих величин.

Перечислим результаты, приведенные в этой главе диссертационной работы:

1. Построена теория возмущений для вычисления совместной функции распределения опережающей и запаздывающей функций Грина гамильтониана (2).

2. Для бинарно разупорядоченной одномерной системы, описывающейся гамильтонианом (2), 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 $W(U)$:

$$D = \frac{c}{4\pi} \int_{-2}^{2} dU (4 - U^2)^{3/2} \ln\Big(\frac{\varepsilon^2}{4 - U^2} + 1\Big) + c\, \Theta(|\varepsilon| - 1) \Big(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2}\Big)^2 + O(c^2) \qquad (5)$$

$$W(U) = \frac{c}{4\pi} \Theta(2 - |U|)(4 - U^2)^{3/2} \ln\Big(\frac{\varepsilon^2}{4 - U^2} + 1\Big) + \qquad (6)$$
$$+ c\Theta(|\varepsilon| - 1) \Big(\frac{\varepsilon^2 - 1}{\varepsilon^2}\Big)^2 \delta\Big(U - \frac{\varepsilon^2 + 1}{\varepsilon}\Big) + O(c^2)$$

Неаналитичность (5) как функции ε связана с появлением при $|\varepsilon| > 1$ краевого состояния с энергией $U_0 = (\varepsilon^2 + 1)/\varepsilon$.

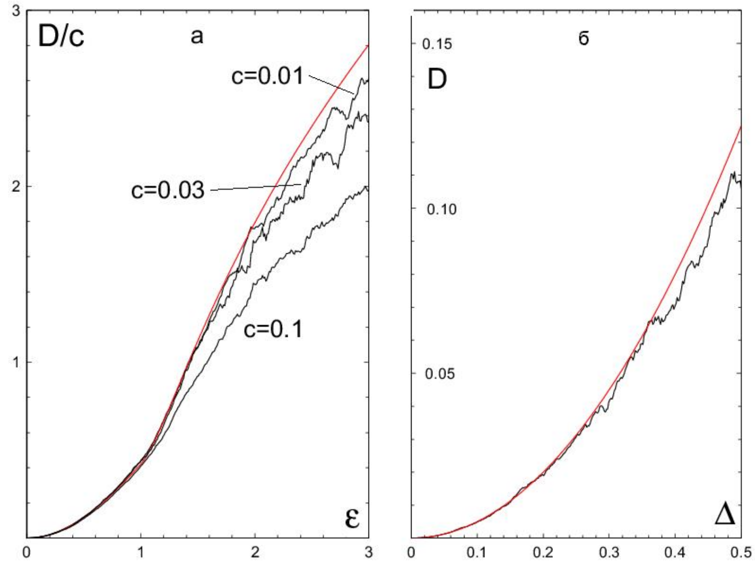

Рис. 3: (а) Случай бинарного беспорядка. Зашумленные кривые – зависимости величины D/c от энергии дефектов ε, полученные численно при разных концентрациях дефектов $c = 0.01, 0.03, 0.1$, гладкая кривая – теоретическая зависимость (5). (б): Случай равномерного беспорядка. Зависимость предельной при $t \to \infty$ плотности возбуждения D на крайнем узле от величины беспорядка Δ. Гладкая кривая получена с помощью (7)

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

$$D = \frac{\Delta^2 M_2}{2} + O(\Delta^3), \qquad W(U) = \Theta(2-|U|)\frac{\Delta^2 M_2}{4\pi}\sqrt{4-U^2} + O(\Delta^3) \tag{7}$$

Все выведенные в данной главе диссертационной работы формулы проверяются компьютерным моделированием (рис.(3) и рис.(4)), которое показывает, что при $D < 0.1$, значащие части формул (5) – (7) дают погрешность меньшую 10%. При этом степень разупорядоченности системы может быть довольно большой, например, значащие части формул (7) оказываются применимыми когда ε_r равновероятно распределено в интервале $[-0.25, 0.25]$.

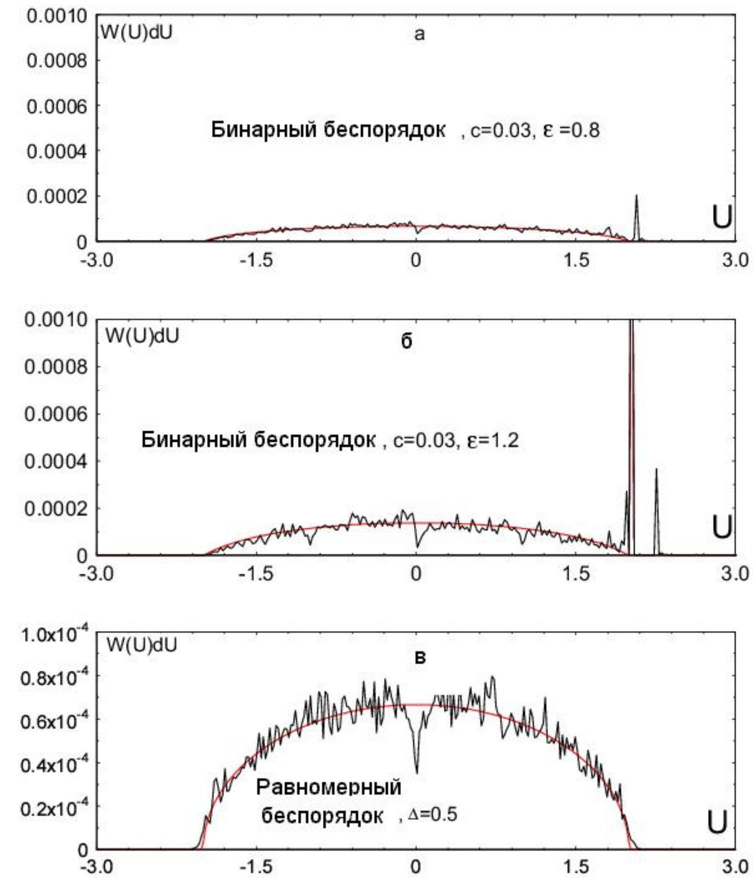

Рис. 4: Функция “участия” – сравнение теории (гладкие кривые, формулы (6),7) с компьютерным моделированием (зашумленные кривые). Для бинарно разупорядоченной цепочки видно появление особенности, связанной с краевым состоянием: (а) – $\varepsilon = 0.8 < 1$, особенность выражена слабо, (б) – $\varepsilon = 1.2 > 1$, появляется высокий узкий пик функции "участия". (в) – функция "участия"для цепочки с равномерным беспорядком при $\Delta = 0.5$. Во всех случаях $dU = 1/50$.

Глава 5.СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЕ СО СЛОЖНОЙ СТРУКТУРНОЙ ЕДИНИЦЕЙ

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 увеличение длины цепочки на одну структурную единицу есть возможность выразить краевую функцию Грина (КФГ) новой цепочки через КФГ исходной цепочки. В данной главе работы мы описываем такую модель, в которой структурной единицей является фрагмент, состоящий из m связанных одинаковых двухуровневых систем. Разупорядоченность этой модели заключается в том, что энегетические расщепления двухуровневых атомов, будучи одинаковыми для атомов, принадлежащих одному фрагменту, могут меняться случайным образом от фрагмента к фрагменту. 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:

$$W(U) = \frac{\Theta(2-|U|)\ \Delta^2 M_2}{\pi m\sqrt{4-U^2}} \sin^2\left[m\, \mathrm{arctg}\left(\frac{\sqrt{4-U^2}}{U}\right)\right] + O(\Delta^3), \qquad D = \frac{\Delta^2 M_2}{2m} + O(\Delta^3) \quad (8)$$

Здесь величины Δ и M_2 являются параметрами функции распределения узельных энергий $P(\varepsilon)$ (которая теперь относится к расщеплению двухуровневых атомов целого фрагмента длиной m) и имеют такой же смысл, как и в формуле (7).

Из формулы (8) следует, что при энергиях $U = \mathcal{E}_n$, определяемых условиями

$$\mathrm{arctg}\left(\frac{\sqrt{4-\mathcal{E}_n^2}}{\mathcal{E}_n}\right) = \frac{\pi n}{m}, \qquad \mathcal{E}_n = \pm\frac{2}{\sqrt{\mathrm{tg}^2[\frac{\pi n}{m}]+1}}, \qquad |\mathcal{E}_n| < 2, \qquad n \text{ – целое,} \quad (9)$$

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[1], 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 $U = \mathcal{E}_n$ (9). Такое "противофазное"поведение вкладов различного порядка должно приводить к тому, что при

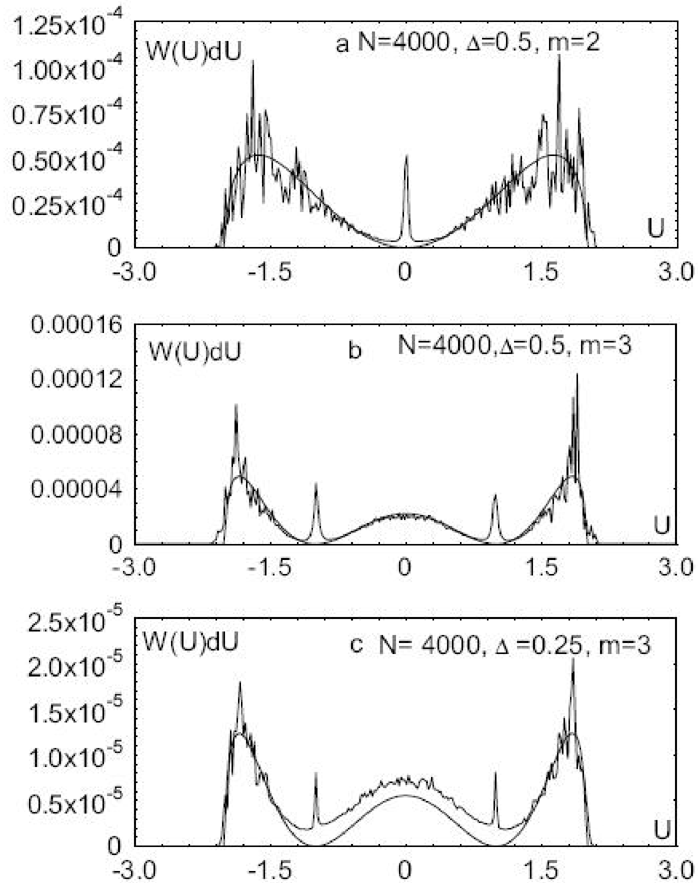

Рис. 5: Распределение степени локализации состояний в одномерных разупорядоченных цепочках со сложной структурной единицей. Зашумленные зависимости получены компьютерным моделированием, гладкие кривые – при помощи формулы (8). Размер случайных матриц во всех случаях $N = 4000$. Значения прочих параметров следующие: (a) $\Delta = 0.5, m = 2$, (b) $\Delta = 0.5, m = 3$, (c) $\Delta = 0.25, m = 3$. Во все случаях $dU = 1/50$.

небольшой степени разупорядоченности (т.е. при малых Δ) формула (8) должна хорошо работать при любых значениях энергии, кроме малых областей вблизи значений $\mathcal{E}_n$. В этих точках (где поправка $\sim \Delta^2$ (8) обращается в нуль) должны наблюдаться узкие максимумы функции участия $W(U)$, соответствующие расходимости следующей поправки. Описанный в заключительной части этой главы диссертации численный эксперимент (результаты которого приведены на рис 5) полностью подтверждает сказанное.

Глава 6. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ В ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ МОДЕЛИ ЛЛОЙДА

В этой главе диссертации методика, использующая построение совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, применяется для исследования локализационных свойств разупорядоченных моделей, отличающихся от рассмотренных выше, как говорят, "классом универсальности". Матрица гамильтониана моделей этого класса имеет стандартный вид (1), а специфика заключается в том, что функция распределения $P(\varepsilon)$ случайных узельных энергий ε_r может убывать настолько медленно, что все ее четные моменты, кроме нулевого, расходятся. Примером подобной модели может служить модель Ллойда[2], в которой $P(\varepsilon)$ является распределением Коши. В настоящей главе работы производится обобщение методики, развитой в предыдущих главах, на случай диагонально разупорядоченных 1D моделей описанного выше класса, когда приведенные ранее формулы (7), 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. Такое обобщение оказывается возможным, если записать предложенные в работе уравнения для совместной статистики функций Грина в матричном виде, причем в качестве базиса взять предложенную в диссертации систему специальных функций. 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 (7), как для быстро убывающих распределений.

Общая постановка задачи и количественные определения вычисляемых в этой главе диссертации величин в точности соответствуют таковым из двух предыдущих глав. Основным результатом данной главы диссертационной работы являются следующие применимые при $D << 1$ выражения для функции участия $W(U)$ и критерия Андерсона

D:

$$W(U) = \frac{(4-U^2)^{3/2}}{4\pi} \int d\varepsilon P(\varepsilon)\, \ln\Big(1+\frac{\varepsilon^2}{4-U^2}\Big), \quad |U|<2, \quad D=\int_{-2}^{2} dUW(U) \qquad (10)$$

Эти выражения справедливы при фактически любой мыслимой функции $P(\varepsilon)$. При $M_2 < \infty$ формулы (10) переходят (при малых Δ) в формулы (7), полученные ранее. При $M_2 = \infty$ зависимость D от Δ качественно меняется. В частности, для модели Ллойда, когда $P(x) = \Delta[\pi(\Delta^2+x^2)]^{-1}$, оказывается возможным явное вычисление интеграла в (10) причем величина D оказывается пропорциональной первой степени Δ, что подтверждается описанным в заключительной части главы компьютерным экспериментом.

Глава 7. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СТЕПЕНИ ЛОКАЛИЗАЦИИ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С КУСОЧНО ПОСТОЯННЫМ СЛУЧАЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

В теории простейших твердотельных разупорядоченных моделей различают непрерывные и дискретные модели. Непрерывные модели используют уравнение Шредингера $[-d^2/dx^2 + \mathcal{U}(x)]\psi = E\psi$ с тем или иным случайным потенциалом $\mathcal{U}(x)$, дискретные модели строятся на основе некоторой случайной матрицы модельного гамильтониана, например, матрицы (1), являющейся основным объектом исследования нашей работы. В данной главе диссертации теория возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина, развитая в предыдущих главах и с успехом примененная там для исследования дискретных моделей (являющихся основным объектом исследования диссертации), используется в настоящей главе для анализа непрерывной разупорядоченной модели. Это показывает многосторонность предлагаемого в диссертации подхода к анализу локализационных свойств случайных систем.

Кратко опишем задачу, исследованную в этой, седьмой, главе диссертационной работы. Рассмотрим одномерную непрерывную разупорядоченную модель с *кусочно постоянным* случайным потенциалом $\mathcal{U}(x)$, равном $u+\varepsilon_n$ внутри интервалов $x \in [b(n-1), bn], n = 1, 2, ..., N$. 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 $x \bar{\in} [0, Nb]$ мы полагаем $\mathcal{U}(x) = 0$. Функцию распределения $P(\varepsilon)$ случайных величин ε_n будем характеризовать шириной Δ и возьмем в таком же виде как и в предыдущих главах. 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. Всюду ниже, как обычно, подразумевается термодинамический предел $N \to \infty$.

В данной главе диссертации рассматривается движение частицы, описываемое дифференциальным уравнением Шредингера в таком случайном потенциале, и вычисляется критерий Андерсона и функция участия $W(U)$. При этом показывается, что эта задача может быть решена с помощью надлежащим образом измененного метода совместной статистики функций Грина. Основными результатами этой главы диссертационной работы являются следующие выражения для функции $W(U)$ и величины D:

$$W(U) = \Theta(-U)\Theta(U-u)\ \left(\frac{\Delta}{u}\right)^2 \frac{M_2}{2\pi}\ \frac{\sin^2 b\sqrt{U-u}}{b\sqrt{U-u}} + O(\Delta^3), \quad u < 0 \tag{11}$$

$$D = \int_u^0 W(U)dU = \left(\frac{\Delta}{u}\right)^2 \frac{M_2}{2\pi b}\left(\sqrt{-u} - \frac{\sin[2b\sqrt{-u}]}{2b}\right) + O(\Delta^3), \tag{12}$$

применимые для описанной выше одномерной непрерывной модели с кусочно постоянным случайным потенциалом.

Глава 8 ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ КРИТЕРИЯ ЛОКАЛИЗАЦИИ АНДЕРСОНА В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ ПРИ КОРРЕЛИРОВАННОМ ДИАГОНАЛЬНОМ БЕСПОРЯДКЕ.

Во всех главах диссертации, посвященным низкоразмерным разупорядоченным системам, мы рассматривали *некоррелированный* диагональный беспорядок, при котором энергии соседних узлов представляют собой *независимые* случайные величины с заданной статистикой. Понятно, что модели случайных систем, в которых беспорядок представлен некоторым δ-коррелированым случайным процессом [1], являются простейшими и следующим возможным шагом на пути усложнения таких моделей является учет корреляций. Вопрос о влияние корреляций является тем более актуальным, что в реальных системах следует ожидать коррелированного беспорядка. 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, основанный на построении совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. В приводимом в этой главе расчете параметром малости является обратный радиус корреляции $1/R$, 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. [1] Основным результатом данной главы диссертации является следующие выражения для критерия Андерсона D и спектральной зависимости степени локализации $W(U)$ коррелированной диагонально разупорядоченной цепочки

$$W(U) = \frac{\bar{\Delta}^2}{4\pi R}\,\mathrm{Re}\int \frac{d\varepsilon\mathcal{P}(\varepsilon)}{\sqrt{4-(U-\varepsilon)^2}} + O(1/R^2), \qquad D = \int W(U)dU = \frac{\bar{\Delta}^2}{4R} + O(1/R^2) \quad (13)$$

применимые при достаточно большом радиусе корреляции R. Функция $\mathcal{P}(\varepsilon)$ в этой формуле имеет смысл функции распределения энергии узла при наличие корреляций.

Глава 9. 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[6]. При этом основным инструментом и объектом изучения по-прежнему служит функция Грина матрицы типа (1), исследуемая в данной диссертационной работе. Кратко опишем приведенные в этой главе результаты.

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 разложе-

[1] Такими являются рассмотренная в Главе 6 задача Ллойда или рассмотренная в Главе 4 задача о бинарно разупорядоченной цепочке при произвольной энергии дефекта.

ние 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 монипулировать диаграммами *упорядоченной* функции Грина с помощью некоторого гипотетического наблюдателя, который, двигаясь по диаграмме, следил бы за ее топологией или за тем, через какие узлы диаграмма проходит, и домножал бы ее на соответствующий весовой фактор. В первых подразделах (подразделы 0.6.1 и 0.6.2) этой главы показано, что замена матричных элементов в разложении функции Грина на некоторые специальным образом построенные *следящие операторы* позволяет в ряде случаев получить математическую реализацию такого наблюдателя.

В последнем подразделе 0.6.3 данной главы методом следящих операторов выполнено исследование нестационарного случайного процесса, который возникает при построении волновой функции так называемого 0-состояния одномерной недиагонально-разупорядоченной модели[6]. При этом каждой реализации этого случайного процесса ставится в соответствие диаграмма из разложения упорядоченной функции Грина матрицы (1), 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 диаграмного 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.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой части мы кратко суммируем постановку задачи диссертационной работы и полученные результаты.

В диссертации изучаются простейшие низкоразмерные твердотельные модели, описываемые гамильтонианом (1). Как показано в диссертационной работе, *несмотря* на простоту гамильтониана (1), 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 (1), при его исследовании возможен прямой компьютерный эксперимент, который позволяет за обозримое время чрезвычайно убедительно проверить получаемые теоретические результаты. Поэтому исследование гамильтониана (1) представляется актуальным для накопления, по-крайней мере, качественной (а иногда и количественной) достоверной информации о трансляционно-несимметричных системах.

Математическим инструментом, применяемым в диссертации для исследования гамильтониана (1), является аппарат функций Грина в его простейшем варианте. Во вводной и обзорной частях диссертации обоснована эффективность такого подхода. Перечислим основные результаты полученные в работе.

1. Для функции Грина гамильтониана (1) 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 электродинамической задачи о прохождении света через пластинку при наличие сильных эффектов пространственной дисперсии и добавочных волн Пекара. В рамках 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 спектральной области экситонного резонанса. Показано, что эта задача может быть поставлена и последовательно решена в терминах гамильтониана (1).

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 с ее помощью 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 трансцедентное уравнение для усредненной функции Грина и явную формулу для границ спектра.

9. Для одномерных разупорядоченных моделей описываемых гамильтонианом (1) с взаимодействием ближайших соседей выведено замкнутое уравнение для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина. Получены общие формулы, связывающие эту статистику с локализационными характеристиками случайной системы – функцией участия и критерием Андерсона (см. ниже). Разработана последовательная теория возмущений для решения полученных уравнений для статистики функций Грина.

10. С помощью развитой теории возмущений для совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина получены аналитические выражения для предельной при $t \to \infty$ плотности возбуждения на краевом узле (критерий Андерсона) для случая бинарного беспорядка с малой концентрацией дефектов и произвольной их энергией, для случая слаборазупорядоченной одномерной системы общего вида с элементарной структурной единицей и слаборазупорядоченной системы со сложной стуктурной единицей.

11. Введены функции участия, позволяющие судить о степени локализации состояний при заданной энергии. В перечисленных выше случаях бинарного беспорядка с малой концентрацией дефектов и слаборазупорядоченной одномерной системы общего вида с элементарной и сложной стуктурной единицей, для этих функций получены аналитические выражения, связывающие их со вторым моментом функции распределения узельных энергий.

12. Метод совместной статистики функций Грина обобщен на случай непрерывной разупорядоченной модели с кусочно постоянным случайным потенциалом. Для этой модели выведены аналитические выражения для всех локализационных характеристик, введенных ранее для дискретных моделей.

13. Предложена модифицированная теория возмущений для решения уравнений для совместной статистики функций Грина, позволяющая получать локализационные характеристики моделей диагонально разупорядоченных систем в том случае, когда функция

распределения узельных энергий не имеет конечных четных моментов выше нулевого. Примером моделей подобного класса является модель Ллойда[2]. Для таких моделей получены аналитические выражения для функции участия и критерия Андерсона.

14. Метод совместной статистики опережающей и запаздывающей функций Грина обобщен на случай коррелированных случайных одномерных моделей. Для моделей этого типа в работе получено замкнутое уравнение на статистику функций Грина, а также формулы, связывающие эту статистику с критерием Андерсона и функцией участия. С помощью разработанной в диссертации теории возмущений получены аналитические выражения для критерия Андерсона и функции участия коррелированных случайных цепочек при большом радиусе корреляции.

15. 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.

16. 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 согласие.

Основные работы, включенные в диссертацию

Результаты, полученные в диссертационной работе, изложены в следующих опубликованных работах автора:

1. Г.Г.Козлов, "Спектральная зависимость степени локализации в одномерной разупорядоченной модели Ллойда"принята к публикации в ТМФ, (2011).

2. G.G.Kozlov, "Spectral Dependence of the Degree of Localization in a 1D Disordered System with a Complex Structural Unit“, Apllied Mathematics, Vol. 2 No. 8, (2011).

3. Г.Г.Козлов, "Вычисление степени локализации в смысле критерия Андерсона для одномерной диагонально разупорядоченной системы“, Теоретическая и математическая физика, т. 162, N^{o}2, с. 286, (2010).

4. Г.Г.Козлов, "Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы с бинарным или равномерным диагональным беспорядком“, Теоретическая и математическая физика, т. 140, $N^o 2$, с. 337, (2004).

5. Г.Г.Козлов, "Спектр поглощения одномерной цепочки с экситоном Френкеля при диагональном беспорядке в виде гиперболических дефектов“, Теоретическая и математическая физика, т. 113, $N^o 2$, с. 331, (1997).

6. Г.Г.Козлов, "Рассеяние света назад конечной двумерной кристаллической пластинкой в области экситонного резонанса - антизеркальное отражение“, Оптика и спектроскопия, т. 101, $N^o 1$, с.161, (2006).

7. Г.Г.Козлов, "Метод вычисления одноэкситонного спектра поглощения пространственно-ограниченных решеток“, Оптика и спектроскопия, т. 82, $N^o 2$, с. 266, (1997).

8. Г.Г.Козлов, "Прохождение света через слоистую систему с экситонами Френкеля“, Оптика и спектроскопия, т. 82, $N^o 5$, с. 839, (1997).

9. 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)

10. 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).

Литература

[1] И.М.Лифшиц, С.А.Гредескул, Л.А.Пастур, Введение в теорию неупорядоченных систем, Москва "Наука 1982.

[2] P.Lloyd, J.Phys.C: Solid State Phys., V.2, p.1717, 1969.

[3] F.J.Dyson, Phys.Rev. **92**, p.1331 (1953).

[4] Onodera Y, Toyozava Y. // J.Phys. Soc. Jap., v.24, p. 341, 1968.

[5] Anderson P.W., Phys.Rev., v. 109, p. 1492, 1958.

[6] G.Theodorou, M.H.Cohen, Phys.Rev. B 13, 4597, 1976.