Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. Н. Лихачев, В. А. Онищук, Стохастические уравнения для флуктуационных потенциалов в донорно-акцепторных системах с малой компенсацией, *ТМФ*, 1997, том 112, номер 2, 295–307

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1044>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.196.121.252

26 апреля 2023 г., 16:32:19

В. Н. Лихачев*, В. А. Онищук*
**СТОХАСТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ
ДЛЯ ФЛУКТУАЦИОННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ
В ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНЫХ
СИСТЕМАХ С МАЛОЙ КОМПЕНСАЦИЕЙ**

Для решения полученных в [1] стохастических уравнений для флуктуационных потенциалов в донорно-акцепторных системах с малой компенсацией K разработана асимптотическая теория возмущений по малым K и на ее основе вычислена поправка к уровню Ферми примесных электронов: $\delta\mu(K) = c_1 K + c_2 K^{3/2} + c_3 K^2 \ln(1/K) + c_4 K^2$. Константы c_i являются суммами асимптотических рядов по малому параметру $\alpha = 0.23$ с коэффициентами, зависящими от Λ , где $1/\Lambda$ – средний размер двухакцепторного локального комплекса. Константа c_1 пропорциональна Λ . Таким образом, несмотря на малую концентрацию двухакцепторных локальных комплексов их структура определяет главный член асимптотики уровня Ферми примесных электронов.

1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] была сформулирована стохастическая система уравнений для флуктуационных потенциалов (ФП) на одноакцепторных локальных комплексах (ОЛК) в донорно-акцепторных системах с малыми коэффициентами компенсации K :

$$\psi_i + \alpha \sum_{j \neq i} \frac{\psi_j}{R_{ij}} = V_i, \quad i = 1, 2, \dots, KN. \quad (1)$$

Здесь $R_{ij} = |\vec{X}_i - \vec{X}_j|$ и предполагается, что ОЛК локализованы на узлах $\vec{X}_i$, распределенных в соответствии с распределением Пуассона с плотностью K в объеме $V = N$. Параметр $\alpha = 0.23$. В правой части (1) стоят значения потенциалов $V_i = V(\vec{X}_i)$, где

$$V(\vec{X}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} V_{\vec{q}}, \quad V_{\vec{q}} = \frac{4\pi i}{\vec{q}^2} \sum_{j=1}^{KN} (\vec{q} \vec{r}_j) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{Y}_j}. \quad (2)$$

Предполагается, что узлы $\vec{Y}_j$ распределены по Пуассону с плотностью K в объеме V и что это распределение независимо от распределения узлов $\vec{X}_j$. При заданных узлах $\vec{Y}_j$

*Отдел электроники органических материалов Института биохимической физики РАН, Москва, Россия

плечи диполей $\vec{r}_j$ вычисляются из пуассоновского распределения N доноров в объеме V как положения ближайших соседей к узлам $\vec{Y}_j$. В (1) и (2) рассматривается только вклад ОЛК, следовательно, переменные $\vec{r}_j$ полагаются независимыми, а кулоновское взаимодействие в (1) и (2) – регуляризованным посредством введения размера $1/\Lambda$ двух-акцепторного локального комплекса:

$$\left(\frac{1}{R_{i,j}}\right)_{\text{reg}} = \frac{4\pi}{V} \sum_{\Lambda} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_{i,j}}}{\vec{q}_+^2}, \quad \vec{q}_+^2 = \vec{q}^2 + \varepsilon^2. \quad (3)$$

Суммы в (2) и (3) берутся по $|\vec{q}| \leq \Lambda$, и в конце вычислений ε стремится к нулю. В [1] было показано, что поправка $\delta\mu(K)$ к уровню Ферми примесных электронов выражается через второй момент ФП:

$$\delta\mu(K) = -\left(\frac{\beta}{2\alpha}\right) \frac{1}{KN} \sum_{j=1}^{KN} \langle \overline{\psi_j^2} \rangle. \quad (4)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по положениям узлов $\vec{X}_j$, а черта – усреднение по узлам $\vec{Y}_j$ и плечам диполей $\vec{r}_j$.

Цель данной работы состоит в вычислении асимптотического поведения $\delta\mu(K)$ при $K \rightarrow 0$ на базе теории возмущений по малой плотности K для системы (1). В разделе 2 развита диаграммная техника для разложения по степеням K усредненной резольвенты (1). Оказалось, что диаграммы являются эйлеровыми графами, а симметричные числа этих диаграмм подсчитываются как числа неэквивалентных эйлеровых путей на таких графах. Сингулярность кулоновского взаимодействия на больших расстояниях приводит, как было показано в [1], к неаналитической зависимости $\delta\mu(K)$ от K при $K \rightarrow 0$, связанной с механизмом самосогласованной экранировки зарядов в ОЛК. По этой причине вклады от диаграмм, возникающие в результате формального разложения усредненной резольвенты по степеням плотности K , расходятся при переходе к пределу $\varepsilon \rightarrow 0$. Для устранения этих расходимостей необходимо выделить класс компактных диаграмм [2] и провести их частичное суммирование в рамках техники скелетных диаграмм [2]. Однако в случае системы (1) возникает нетривиальная проблема подсчета симметричных чисел: дело в том, что симметричные числа некомпактных диаграмм в рассматриваемом нами случае не равны произведениям симметричных чисел компактных компонент. Аналогично в случае скелетных диаграмм симметричное число диаграммы, полученной вставками нетривиальных двуххвостов в скелетную диаграмму, не равно произведению симметричных чисел вставок и симметричного числа исходной скелетной диаграммы. Тем не менее компактные и скелетные диаграммы удастся просуммировать и записать уравнения Дайсона [2] для массового оператора. Рассмотрение этих вопросов вынесено в приложения А и Б. В разделе 3 мы приводим результат асимптотического решения уравнения Дайсона, а также асимптотическое выражение для $\delta\mu(K)$ при $K \rightarrow 0$. Функциональный вид этого выражения отличается от найденного в [1] в приближении “размазанных углов”. Как и в [1], сохраняется парадоксальный вывод: ведущий член асимптотического представления формируется структурой двух-акцепторного локального комплекса. Это связано с сингулярным поведением кулоновского взаимодействия ОЛК на малых расстояниях.

2. ДИАГРАММНАЯ ТЕХНИКА ДЛЯ $\delta\mu(K)$

Определим матрицу A :

$$A_{i,j} = 1/R_{i,j} \quad (i \neq j), \quad A_{i,i} = 0, \quad i, j = 1, 2, \dots, KN. \quad (5)$$

Формальное решение системы (1) записывается через резольвенту $B(\alpha)$ этой матрицы:

$$\psi_i = \sum_{j=1}^{KN} B_{i,j}(\alpha) V_j, \quad B(\alpha) = (E + \alpha A)^{-1}. \quad (6)$$

После подстановки решения (6) в (4) и усреднения по распределениям $\{\vec{Y}_j\}$, $\{\vec{r}_j\}$ получим

$$\delta\mu(K) = -\frac{\beta}{2\alpha} \frac{dS(\alpha)}{d\alpha}, \quad S(\alpha) = \frac{16\pi^2\alpha}{3} K \overline{r^2} \sum_{\Lambda} \frac{\Gamma(\vec{q})}{q_+^2}. \quad (7)$$

Здесь $\alpha = 0.23$, $\beta = 1.16$ — числа, приведенные в [1]; $\overline{r^2}$ — средний квадрат плеча диполя и

$$\Gamma(\vec{q}) = \Gamma_{1,1} + \Gamma_{1,2}(\vec{q}) = \langle B_{1,1} \rangle + \langle B_{1,2} \exp(i\vec{q} \cdot (\vec{X}_1 - \vec{X}_2)) \rangle. \quad (8)$$

Усреднение в (8) проводится по пуассоновскому распределению узлов $\vec{X}_j$ в объеме $V = N$ с плотностью K .

Рис. 1

Будем вычислять средние $\Gamma_{1,1}$ и $\Gamma_{1,2}$, разлагая резольвенту (6) в ряд по степеням α^L . В случае $L = 0$ имеем $B^{(0)} = 1$; $\Gamma_{1,1} = 1$; $\Gamma_{1,2} = 0$. Графически этот случай изображен на рис. 1. В случае $L = 1$ имеем $B^{(1)}(\alpha) = -\alpha A$, т.е.

$$\Gamma_{1,1}^{(1)} = 0, \quad \Gamma_{1,2}^{(1)} = KN \left\langle e^{i\vec{q} \cdot (\vec{X}_1 - \vec{X}_2)} \left(-\frac{\alpha}{R_{12}} \right) \right\rangle = \frac{-4\pi\alpha K}{\vec{q}_+^2}. \quad (9)$$

При усреднении в (9) использовалось разложение (3). В случае $L = 2$ имеем

$$B_{1,1}^{(2)} = \alpha^2 \sum_i^* A_{1,i} A_{i,1}, \quad B_{1,2}^{(2)} = \alpha^2 \sum_i^* A_{1,i} A_{i,2}. \quad (10)$$

Здесь впервые появляются *неприводимые суммы*, помеченные в формулах (10) звездочками и изображаемые на рис. 1 соответствующими графами. По определению граф, изображающий неприводимую сумму, имеет все индексы узлов различными, по буквенным индексам узлов проводится суммирование. После подстановки (10) в (8) получим

$$\Gamma_{1,1}^{(2)} = \frac{K}{V} \sum_{\Lambda} \frac{(-4\pi\alpha)^2}{(\vec{q}_+^2)^2}, \quad \Gamma_{1,2}^{(2)} = \frac{(-4\pi\alpha)^2 K^2}{(\vec{q}_+^2)^2}. \quad (11)$$

Из (11) видно, что первая сумма расходится при $\varepsilon \rightarrow 0$ (“инфракрасная катастрофа”). В случае $L = 3$ имеем разложения на неприводимые суммы

$$\begin{aligned} B_{1,1}^{(3)} &= (-\alpha)^3 \sum_{i,j}^* A_{1,i} A_{i,j} A_{j,1}, \\ B_{1,2}^{(3)} &= -\alpha^3 (A_{1,2})^3 - \alpha^3 \sum_i^* A_{1,2} A_{2,i} A_{i,2} - \\ &\quad - \alpha^3 \sum_i^* A_{1,i} A_{i,1} A_{1,2} - \alpha^3 \sum_{i,j}^* A_{1,i} A_{i,j} A_{j,2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Разложение (12) также графически изображено на рис. 1. Здесь впервые появляются два одинаковых графа (“b” и “c” на рис. 1), отвечающие различным неприводимым суммам – второй и третьей в разложении $B_{1,2}^{(3)}$. Анализ причин появления одинаковых графов в случаях $L \geq 4$ привел нас к следующим выводам.

Во-первых, каждой неприводимой сумме соответствует *эйлеров граф*. По определению эйлеров граф допускает *эйлеров путь*, т.е. непрерывное отображение отрезка на граф, взаимно однозначное на каждом из ребер графа¹⁾. Эйлеровы графы типа $\Gamma_{1,1}$ имеют все вершины с четными индексами инцидентности. Эйлеровы графы типа $\Gamma_{1,2}$ имеют пару вершин с нечетными индексами, эйлеровы пути в этом случае начинаются и оканчиваются в нечетных вершинах.

Во-вторых, группа $G(\Gamma)$ графа Γ определяется как множество непрерывных деформаций графа Γ в себя. Конечный результат действия элемента группы записывается в виде пары подстановок вершин и ребер, при этом инцидентности вершин и ребер сохраняются. Эйлеров путь на графе задается последовательностью проходимых вдоль него ребер. Два эйлеровых пути *эквивалентны*, если найдется элемент симметрии из группы графа, переводящий один путь в другой.

В-третьих, число $n(\Gamma)$ различных неприводимых сумм с одинаковым графом Γ равно числу неэквивалентных эйлеровых путей на графе. Например (см. рис. 1), все пути на графах “a” и “d” эквивалентны, тогда как неприводимые суммы “b” и “c” суть не что иное, как изображения неэквивалентных эйлеровых путей на одном и том же эйлеровом графе. При подсчете вкладов от графов неприводимые суммы с одинаковыми графами

¹⁾ Однозначность нарушается в вершинах графа.

дают одинаковые вклады. Поэтому достаточно подсчитать вклады от топологически различных графов, умножив эти вклады на их *симметричные числа* $n(\Gamma)$.

В-четвертых, правила подсчета вкладов $w(\Gamma)$ от графов в средние $\Gamma_{1,1}, \Gamma_{1,2}$ таковы:

1. На графе типа $\Gamma_{1,2}(\vec{q})$ нарисует свободные концы, пометив их импульсом $\vec{q}$. Фактору $\exp(i\vec{q}\vec{x}_1)$ (см. (8)) сопоставим стрелку, выходящую из вершины 1 графа, а фактору $\exp(i\vec{q}\vec{x}_2)$ – стрелку, входящую в вершину 2 графа. На ребрах графа расставим стрелки и импульсы так, чтобы в каждой вершине сумма входящих в нее импульсов была равна сумме выходящих.

2. Каждому ребру графа $\Gamma_{1,2}$, несущему импульс $\vec{q}$, сопоставим фактор $(-4\pi\alpha)/\vec{q}_+^2$, перемножим факторы от ребер и по каждому внутреннему импульсу возьмем сумму $(1/V)\sum_{\Lambda}$. Полученный результат умножим на $K^{\nu-1}n(\Gamma)$, где ν – число вершин графа Γ , $n(\Gamma)$ – его симметричное число.

Рис. 2

3. Условимся рассматривать графы $\Gamma_{1,1}$ по аналогии с *двухвостками* $\Gamma_{1,2}$. Для этого присоединим пару внешних линий, несущих импульсы $\vec{q}$, к каждой вершине графа и сделаем это столькоми способами, сколько возникнет неэквивалентных двухвосток. При этом, подсчитывая симметричные факторы таких двухвосток, следует рассматривать только те пути, которые начинаются и оканчиваются в выделенной присоединением вершине. На рис. 2а дан пример расщепления графа $\Gamma_{1,1}$ на двухвостки. Симметричное число графа равно сумме симметричных чисел двухвосток. Вклады от двухвосток подсчитываются по правилам п. 2.

Уже в низших порядках теории возмущений по степеням α^L вклады от двухвосток расходятся в пределе $\epsilon \rightarrow 0$. Эта расходимость, связанная с медленным убыванием кулоновского потенциала на больших расстояниях, устраняется суммированием вкладов расходящихся двухвосток во всех порядках по α^L . Такое суммирование связано с переходом к компактным двухвосткам и записью интегрального уравнения Дайсона для

суммы $M(\vec{q})$ компактных двухвосток в терминах скелетных диаграмм [2]. Переход к компактным двухвосткам основан на тождестве

$$\sum_{\Gamma^{(r)}} w(\Gamma^{(r)}) = \left(\frac{-q_0^2}{\vec{q}^2 +} \right)^{r-1} (M(\vec{q}))^r, \quad q_0^2 = 4\pi\alpha K. \quad (13)$$

В левой части тождества (13) стоит сумма вкладов $w(\Gamma^{(r)})$ по всем неэквивалентным двухвосткам, содержащим r компактных подграфов. Доказательство тождества (13) приводится в приложении А. Суммируя в (13) по $r \geq 0$, получим

$$\Gamma(\vec{q}) \equiv \Gamma_{1,1} + \Gamma_{1,2}(\vec{q}) = \frac{\vec{q}^2 M(\vec{q})}{\vec{q}^2 + q_0^2 M(\vec{q})}. \quad (14)$$

Поскольку вклады в $\Gamma_{1,2}(\vec{q})$ при $|\vec{q}| \rightarrow \infty$ обращаются в нуль, а $\Gamma_{1,1}$ не зависит от $\vec{q}$, имеем из (14)

$$\Gamma_{1,1} = M(\infty), \quad \Gamma_{1,2}(\vec{q}) = \Gamma(\vec{q}) - M(\infty). \quad (15)$$

Формулы (14) и (15) сводят проблему вычисления $\Gamma(\vec{q})$ к вычислению суммы $M(\vec{q})$ вкладов от компактных двухвосток.

Приведем еще запись вклада от компактной петли, изображенной на рис. 2б,

$$W(\Gamma_2^1) = \frac{K}{V} \sum_{\Lambda} \left(\frac{-4\pi\alpha}{\vec{q}^2 +} \right)^2 \Gamma(\vec{q}). \quad (16)$$

Для вычисления $M(\vec{q})$ воспользуемся техникой скелетных диаграмм [2]. Двухвостку $\Gamma_{1,2}^{(1)}(\vec{q})$, изображенную на рис. 1, назовем *тривиальной*, компактный граф Γ – *скелетным*, если все его собственные двухвостки тривиальны. По определению вклад скелетного графа $W(\Gamma)$ вычисляется по правилам, сформулированным выше для обыкновенных графов, но только в случае $W(\Gamma)$ каждому ребру с импульсом $\vec{q}$ сопоставляется фактор

$$G(\vec{q}) \equiv \frac{\Gamma_{1,2}(\vec{q})}{K}. \quad (17)$$

Таким образом, в силу соотношений (14), (15) и (17) каждый вклад $W(\Gamma)$ скелетного графа Γ является функционалом от “массового оператора” $M(\vec{q})$. Преимущество введения скелетных графов связано с теоремой о скелетных диаграммах:

ТЕОРЕМА. Пусть Γ – заданная скелетная диаграмма и $\{\bar{\Gamma}\}$ – множество всех неэквивалентных диаграмм, полученных из данной скелетной диаграммы Γ вставками нетривиальных двухвосток вместо ребер Γ . Тогда имеем

$$\sum_{\{\bar{\Gamma}\}} w(\bar{\Gamma}) = W(\Gamma). \quad (18)$$

В левой части (18) стоит сумма по вкладам от диаграмм множества $\{\bar{\Gamma}\}$, а справа – вклад от скелетной диаграммы Γ . Доказательство теоремы дано в приложении Б. Следствием теоремы о скелетных диаграммах является запись $M(\vec{q})$ в виде суммы вкладов от всех компактных неэквивалентных двухвосток:

$$M(\vec{q}) = 1 + \sum_{\nu \geq 2} \sum_{n=1}^{\infty} W(\Gamma_{\nu}^n). \quad (19)$$

Рис. 3

Здесь нижний индекс у Γ_ν^n означает число вершин диаграммы, а верхний индекс – порядковый номер диаграммы в той или иной схеме перечисления диаграмм в классе Γ_ν . Число неэквивалентных диаграмм в таком классе бесконечно при любом $\nu \geq 2$ из-за возможности неограниченного роста числа L ребер при фиксированном числе вершин. Число внутренних импульсов компактного графа $(L - \nu + 1)$ не может быть меньше двух, следовательно, для любого скелетного графа класса Γ_ν его вклад в правую часть (19) пропорционален $(K\alpha)^{\nu-1}$. Таким образом, правая часть (19) представляет собой формальный ряд по степеням $(K\alpha)^{\nu-1}$. Коэффициенты этого ряда суть ряды по степеням α^L , поскольку при фиксированном числе вершин каждое новое ребро дает фактор $4\pi\alpha$. Из-за сингулярности при $K \rightarrow 0$ интегралов, содержащихся во вкладах от скелетных диаграмм, формальные степенные разложения, упомянутые выше, преобразуются в асимптотическое разложение по малым K и малым α с неаналитическим поведением при нулевых значениях этих параметров. Соотношение (19) есть не что иное, как уравнение Дайсона для $M(\vec{q})$. Его графическое изображение со вкладами от диаграмм с $\nu = 1, 2, 3, 4$ дано на рис. 3.

3. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДАЙСОНА

Из (7) и (14) находим

$$S(\alpha) = \frac{8\alpha}{3} K \overline{r^2} \int_0^\Delta \frac{M(q) q^2 dq}{q^2 + q_0^2 M(q)}, \quad q = |\vec{q}|. \quad (20)$$

Поскольку $\Lambda = O(1)$ и $M(q)$ – плавная функция q , мы заменим в (20) $M(q)$ на $M(0)^2$ и

²⁾ Такая замена не изменит функциональной структуры асимптотической формулы, но изменит константы.

разложим интеграл в (20) по малому параметру Q_0 :

$$S(a) = \frac{8\alpha}{3} K \overline{r^2} M(0) \left(\Lambda - \frac{\pi}{2} + \frac{Q_0^2}{\Lambda} + \dots \right), \quad (21)$$

где

$$Q_0^2 = M(0) q_0^2. \quad (22)$$

Полагая в (22) $M(0) = 1$ и подставляя (21) в (7), мы получим для $\delta\mu(K)$ асимптотическую формулу, найденную в [1] в приближении “размазанных узлов” (см. (29) в [1]). Таким образом, выход за это приближение связан с отысканием поправок к $M(0)$ из уравнения Дайсона (19). Наличие малого параметра $K\alpha$ подсказывает необходимость искать решение (19) на пути последовательных приближений, начинающихся с нулевого приближения $M^{(0)} = 1$. Подставляя это приближение в (17), получим нулевое приближение для факторов от ребер при записи скелетных вкладов:

$$G^{(0)}(\vec{q}) = -\frac{4\pi\alpha}{\vec{q}^2 + q_0^2}. \quad (23)$$

Первое приближение $M^{(1)}(q)$ получается подстановкой нулевого приближения (23) в правую часть уравнений Дайсона (19). Мы подсчитали асимптотическое ($K \rightarrow 0$) выражение для таких вкладов от диаграмм с числом вершин $\nu \leq 4$, ограничиваясь при этом учетом вкладов от графов с малыми числами ребер, поскольку с ростом числа ребер вклады приобретают дополнительные факторы $2\alpha/\pi$. Ниже мы приводим результаты асимптотического вычисления ($q_0 \rightarrow 0$) для графов с двумя вершинами, изображенными на рис. 3:

$$W(\Gamma_2^1) = q_0^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right) \int_0^\Lambda \frac{dq}{q^2 + q_0^2} \approx q_0 \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right) \left(\frac{\pi}{2} - \gamma + O(\gamma^3) \right), \quad (24a)$$

$$\begin{aligned} W(\Gamma_2^2) &= -q_0^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right) \frac{1}{4} \int_0^1 \frac{x dx}{x^2 + \gamma^2} \int_0^1 \frac{y dy}{y^2 + \gamma^2} \ln \left[\frac{(x+y)^2 + \gamma^2}{(x-y)^2 + \gamma^2} \right] \approx \\ &\approx -\alpha^2 q_0^2 [\ln(1/\gamma) + O(\gamma^2)], \end{aligned} \quad (24б)$$

$$W(\Gamma_2^3) \approx q_0^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^3 C_4(\Lambda), \quad (24в)$$

$$W(\Gamma_2^4) \approx q_0^2 \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^4 C_5(\Lambda), \quad (24г)$$

где

$$\gamma = (q_0/\Lambda), \quad C_n(\Lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left(\frac{1}{2r} \int_0^{\Lambda r} \frac{\sin x}{x} dx \right)^n r^2 dr. \quad (25)$$

Мы видим, что из-за сингулярного поведения при $q_0 \rightarrow 0$ интегралов, входящих во вклады от скелетных диаграмм, формальные степени асимптотических членов изменяются и возникает их неаналитическое поведение при $K \rightarrow 0$. Аналогично были вычислены и

асимптотические выражения для вкладов от диаграмм с числом вершин $\nu = 3, 4$, изображенных на рис. 3. Собирав все вклады в $M(0)$ до порядков $O(q_0^2)$ и $O(\alpha^2)$ включительно, можно получить следующую асимптотическую формулу:

$$\delta\mu(K) \approx -\frac{4\beta}{3\alpha} K \overline{r^2} \left[\Lambda - q_0 \left(\frac{3\pi}{4} - \frac{5}{2} \alpha \Lambda \right) - q_0^2 (4\alpha^2 \Lambda \ln(1/q_0)) + \right. \\ \left. + q_0^2 \left(\frac{2}{\Lambda} - 3\alpha \left(\frac{3\pi}{4} + \frac{2}{\pi} \right) + \alpha^2 \left(\frac{\Lambda}{2} - 4\Lambda \ln \Lambda \right) \right) \right]. \quad (26)$$

Из (26) ясна функциональная структура асимптотического разложения $\delta\mu(K)$. Именно при $q_0 \rightarrow 0$ имеется семейство функций

$$\phi_0(q_0) = 1, \quad \phi_1(q_0) = q_0, \quad \phi_2(q_0) = q_0^2 \ln(1/q_0), \quad \phi_3(q_0) = q_0^2,$$

удовлетворяющее асимптотическому критерию [3]: $\lim(\phi_{n+1}/\phi_n) = 0$ при $q_0 \rightarrow 0$. Константы при этих функциях являются, в свою очередь, асимптотическими рядами по малому параметру α с коэффициентами, зависящими от Λ . Полагая в (26) $\alpha = 0$, получим результат приближения “размазанных узлов”, найденный в [1]. Учет дискретного расположения узлов меняет как функциональную структуру асимптотической формулы (член $q_0^2 \ln(1/q_0)$), так и константы. Главный член в правой части (26) обусловливается средним размером $1/\Lambda$ двухакцепторного локального комплекса (ДЛК). Если учесть, что концентрация ДЛК имеет порядок $O(K^2)$, то такое асимптотическое поведение кажется на первый взгляд парадоксальным. В действительности оно связано с сингулярностью дипольного кулоновского взаимодействия на малых расстояниях и необходимостью регуляризации этого взаимодействия на расстояниях порядка размера ДЛК.

Авторы выражают благодарность член-корр. РАН А. А. Овчинникову и участникам руководимого им семинара за обсуждение результатов.

Работа финансировалась грантом МНТЦ № 015-94 и частично грантом РФФИ 96-03-32279a/520.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Вывод тождества (13)

Пусть Γ – двухвостка, содержащая r компактных собственных двухвосток Γ_i . Обозначим через $w^*(\Gamma)$, $w^*(\Gamma_i)$ вклады этих двухвосток, подсчитанные без учета симметричных чисел $n(\Gamma)$ и $n(\Gamma_i)$, и отметим очевидные связи

$$w(\Gamma) = n(\Gamma)w^*(\Gamma), \quad w(\Gamma_i) = n(\Gamma_i)w^*(\Gamma_i), \quad (A.1)$$

$$w^*(\Gamma) = \left(\frac{q_0^2}{\bar{q}^2} \right)^{r-1} \prod_{i=1}^r w^*(\Gamma_i). \quad (A.2)$$

В общем случае $n(\Gamma) \neq n(\Gamma_1)n(\Gamma_2) \dots n(\Gamma_r)$, и именно это вызывает сложность при выводе (13). Для решения этой проблемы необходимо прояснить связи между симметричными числами $n(\Gamma)$ и $n(\Gamma_i)$. С этой целью определим *поляризованную двухвостку* (ПД) как диаграмму типа $\Gamma_{1,2}$, у которой нечетные вершины индексированы числами 1, 2. С каждой двухвосткой Γ ассоциированы две ПД, которые будем обозначать $\mathfrak{J}$

и $\mathfrak{J}^+$. Эти ПД отличаются нумерацией нечетных вершин. При этом возможны два случая: а) $\mathfrak{J} \sim \mathfrak{J}^+$, когда существует элемент σ группы $G(\Gamma)$ со свойством $\mathfrak{J}^+ = \sigma \mathfrak{J}$ (при этом вершина 1 переходит в вершину 2 и наоборот); б) $\mathfrak{J} \approx \mathfrak{J}^+$, т.е. такого элемента группы нет. Два эйлеровых пути на $\mathfrak{J}$ эквивалентны, если они эквивалентны на Γ как пути с неподвижными концами. Будем обозначать через $n(\mathfrak{J})$ число эквивалентных путей на $\mathfrak{J}$. С помощью понятия ПД в леммах 1–3 устанавливается связь между симметричными числами $n(\Gamma)$, $n(\Gamma_i)$.

ЛЕММА 1. Пусть Γ – двухвостка с r компактными составляющими Γ_i . Тогда выбор поляризации Γ однозначно определяет упорядоченную последовательность поляризаций ее составляющих $\mathfrak{J} = (\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$, при этом симметричные числа поляризованных двухвосток связаны мультипликативно:

$$n(\mathfrak{J}) = n(\mathfrak{J}_1)n(\mathfrak{J}_2) \dots n(\mathfrak{J}_r). \quad (\text{A.3})$$

Доказательство леммы – следствие определений ПД и эйлеровых путей на ПД.

ЛЕММА 2. Если $\mathfrak{J}$ и $\mathfrak{J}^+$ – две поляризованные двухвостки, ассоциированные с Γ , то

$$\begin{aligned} n(\mathfrak{J}) &= n(\mathfrak{J}^+) \quad \text{и} \quad n(\Gamma) = n(\mathfrak{J}) \quad \text{при} \quad \mathfrak{J} \sim \mathfrak{J}^+, \\ n(\Gamma) &= n(\mathfrak{J}) + n(\mathfrak{J}^+) \quad \text{при} \quad \mathfrak{J} \approx \mathfrak{J}^+. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Для доказательства леммы 2 рассмотрим на Γ путь $C = (L_1, L_2, \dots, L_n)$, задаваемый последовательностью ребер, проходимых вдоль него. Каждому такому пути сопоставим обратный путь $C^+ = (L_1^+, L_2^+, \dots, L_n^+)$, полагая $L_i^+ = L_{n-i+1}$. Нетрудно видеть, что $C_1 \sim C_2$ тогда и только тогда, когда $C_1^+ \sim C_2^+$. Поэтому, если $P(\mathfrak{J})$ и $P(\mathfrak{J}^+)$ – множества неэквивалентных путей на $\mathfrak{J}$ и $\mathfrak{J}^+$, соответственно, то отображение $P(\mathfrak{J}) \rightarrow P(\mathfrak{J}^+)$, заданное правилом $C \rightarrow C^+$, является биекцией и, следовательно, $n(\mathfrak{J}) = n(\mathfrak{J}^+)$. Далее, если $\mathfrak{J} \sim \mathfrak{J}^+$, то $C \sim C^+$ для любого пути C из $P(\mathfrak{J})$, следовательно, $n(\Gamma) = n(\mathfrak{J})$. Если же $\mathfrak{J} \approx \mathfrak{J}^+$, то для любого пути $C \in P(\mathfrak{J})$ имеем: $C^+ \in P(\mathfrak{J}^+)$ и $C \approx C^+$. Следовательно, $P(\Gamma) = P(\mathfrak{J}) \cup P(\mathfrak{J}^+)$, $P(\mathfrak{J}) \cap P(\mathfrak{J}^+) = \emptyset$ и $n(\Gamma) = n(\mathfrak{J}) + n(\mathfrak{J}^+)$. Лемма 2 доказана.

Ниже нам будет удобно обозначать символом $[\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r]$ неполяризованную двухвостку Γ , имеющую поляризации $\mathfrak{J} = (\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$ и $\mathfrak{J} = (\mathfrak{J}_r^+, \mathfrak{J}_{r-1}^+, \dots, \mathfrak{J}_1^+)$. Определим вклад от ПД как

$$w(\mathfrak{J}) = n(\mathfrak{J})w^*(\Gamma). \quad (\text{A.5})$$

С учетом соотношений (A.1), (A.2) и (A.3) этот вклад можно записать в виде

$$w(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r) = \left(-\frac{q_0^2}{q^2}\right)^{r-1} \prod_{i=1}^r n(\mathfrak{J}_i)w^*(\Gamma_i). \quad (\text{A.6})$$

Из (A.1), (A.6) и (A.4) имеем

$$\begin{aligned} w[\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r] &= w(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r), \quad \text{если} \quad \mathfrak{J} \sim \mathfrak{J}^+, \\ w[\mathfrak{J}, \mathfrak{J}, \dots, \mathfrak{J}] &= w(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r) + w(\mathfrak{J}_r^+, \mathfrak{J}_{r-1}^+, \dots, \mathfrak{J}_1^+), \quad \text{если} \quad \mathfrak{J} \approx \mathfrak{J}^+. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Соотношение между симметричными числами $n(\Gamma_i)$ компактных составляющих и симметричными числами $n(\mathfrak{J}_i)$ их поляризаций определяется следующей леммой.

ЛЕММА 3. Пусть Γ – двухвостка с r компактными составляющими Γ_i . Тогда

$$\sum_{(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)} \prod_{i=1}^r n(\mathfrak{J}_i) = \prod_{i=1}^r n(\Gamma_i). \quad (\text{A.8})$$

Суммирование в (A.8) производится по всем различным упорядоченным наборам $(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$ поляризации компактных составляющих. Два таких набора считаются равными, если поляризованные компоненты этих наборов с одинаковыми индексами эквивалентны.

При $r = 1$ равенство (A.8) совпадает с (A.4). При $r > 1$ доказательство (A.8) завершается индукцией.

Переходим к выводу тождества (13). Этот вывод основан на вычислении двумя различными способами суммы

$$S_r = \sum_{(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)} w(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r) \quad (\text{A.9})$$

по всем различным упорядоченным наборам поляризаций $(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$ компактных компонент, где каждая из компактных компонент пробегает множество всех компактных двухвосток. Напомним, что двухвостка типа $\Gamma_{1,1}$ всегда компактна и ее поляризации эквивалентны.

Первый способ. Заметим, что соотношение $[\mathfrak{J}'_1, \mathfrak{J}'_2, \dots, \mathfrak{J}'_r] \sim [\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r]$ возможно только в двух случаях: либо $\mathfrak{J}'_i \sim \mathfrak{J}_i$, либо $\mathfrak{J}'_i \sim \mathfrak{J}_{r-i+1}$ для всех i . Если еще учесть (A.7), то из (A.9) следует

$$S_r = \sum_{[\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r]} w[\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r] \equiv \sum_{\Gamma^{(r)}} w(\Gamma^{(r)}), \quad (\text{A.10})$$

где $\Gamma^{(r)}$ пробегает все неэквивалентные двухвостки с r компактными компонентами.

Второй способ. Заметим, что классификацию упорядоченных наборов $(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$ можно провести в два этапа. На первом этапе перечисляем все различные последовательности $(\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_r)$, состоящие из компактных компонент. На втором этапе перечисляем при фиксированном наборе $(\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_r)$ все различные наборы из поляризованных компонент $(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)$. Используя эту классификацию, подставим (A.6) в (A.9) и получим

$$S_r = \left(-\frac{q_0^2}{q^2}\right)^{r-1} \sum_{(\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_r)} \left[\sum_{(\mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_r)} \prod_{i=1}^r n(\mathfrak{J}_i) \right] \prod_{j=1}^r w^*(\Gamma_j). \quad (\text{A.11})$$

Теперь подставим тождество (A.8) в (A.11) и воспользуемся соотношениями (A.1). Тогда имеем

$$S_r = \left(-\frac{q_0^2}{q^2}\right)^{r-1} \left(\sum_{\Gamma_c} w(\Gamma_c) \right)^r \equiv \left(-\frac{q_0^2}{q^2}\right)^{r-1} (M(q))^r. \quad (\text{A.12})$$

Сумма в (A.12) берется по вкладкам $w(\Gamma_c)$ от всех компактных двухвосток Γ_c . Сравнивая результаты вычисления S_r двумя способами: (A.10) и (A.12), получаем тождество (13).

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Теорема о скелетных диаграммах

Доказательство этой теоремы основано на следующих трех замечаниях.

1. Путь на скелетном графе Γ с L ребрами задается последовательностью $C = (r_1, r_2, \dots, r_l)$ поляризованных ребер графа. Действие группы $G(\Gamma)$ на путь сводится к перестановкам ребер с возможным изменением их поляризаций. Существенно, что при действии этой группы на множестве путей $P(\Gamma)$ графа стационарные подгруппы [4] путей тривиальны. Отсюда следует, что орбиты путей имеют по $G^\#(\Gamma)$ элементов и что симметричное число графа вычисляется по формуле

$$n(\Gamma) = \frac{P^\#(\Gamma)}{G^\#(\Gamma)}, \quad (\text{Б.1})$$

где $P^\#$ и $G^\#$ обозначают мощности соответствующих множеств.

2. Пусть $(\Gamma_i)_1^L$ – двухвостки, $(\mathfrak{J}_i)_1^L$ – какие-то их поляризации и Γ – скелетный граф с L ребрами. Символом $\tilde{\Gamma} \equiv (\Gamma, C; \mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_l)$ обозначим результат вставки поляризованных двухвосток вместо ребер графа Γ при продвижении по графу вдоль эйлера пути C . С графом $\tilde{\Gamma}$ ассоциирован *маркированный скелетный граф* $\tilde{\Gamma}^*$ – это граф Γ , ребра которого маркированы символами поляризованных двухвосток вдоль эйлера пути C . Маркировка нарушает эквивалентность ребер, следовательно, группа симметрии маркированного графа $G(\tilde{\Gamma}^*)$ является собственной подгруппой $G(\Gamma)$. Каждый путь C из $P(\Gamma)$ порождает семейство путей из $P(\tilde{\Gamma})$, петляющих по поляризованным двухвосткам-вставкам, следовательно, $P(\tilde{\Gamma}) = P(\Gamma) \otimes P(\mathfrak{J}_1) \otimes \dots \otimes P(\mathfrak{J}_l)$. Напомним, что имеется канонический изоморфизм $P(\mathfrak{J}_i) \approx P(\mathfrak{J}_i^+)$, порожденный переходом от пути C на $\mathfrak{J}$ к обратному пути C^+ на $\mathfrak{J}^+$. Далее, группа графа $\tilde{\Gamma}$ просто выражается через группы поляризованных вставок и группу маркированного графа: $G(\tilde{\Gamma}) = G(\tilde{\Gamma}^*) \otimes G(\mathfrak{J}_1) \otimes G(\mathfrak{J}_2) \otimes \dots \otimes G(\mathfrak{J}_l)$. Имеется, кроме того, полезный изоморфизм $G(\mathfrak{J}_i) \approx G(\mathfrak{J}_i^+)$, порожденный операцией перемены номеров нечетных вершин. Применяя после этих замечаний формулу (Б.1) к вычислению $n(\tilde{\Gamma})$, получим

$$n(\tilde{\Gamma}) = \frac{G(\Gamma)^\#}{G(\tilde{\Gamma}^*)^\#} n(\Gamma) \prod_{i=1}^l n(\mathfrak{J}_i). \quad (\text{Б.2})$$

Напомним, что согласно (А.4) $n(\mathfrak{J}_i^+) = n(\mathfrak{J}_i)$. Поэтому правая часть (Б.2) не зависит от поляризации компактных вставок.

3. Смысл фактора $G(\Gamma)^\# / G(\tilde{\Gamma}^*)^\#$, входящего в (Б.2), следующий: это число различных символов $(\Gamma, C; \mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_l)$, отвечающих одному и тому же графу $\tilde{\Gamma}$. В самом деле, определим действие группы $G(\Gamma)$ на такие символы соотношением

$$\sigma^{-1}(\Gamma, C; \mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_l) = (\Gamma, C; \sigma\mathfrak{J}_1, \sigma\mathfrak{J}_2, \dots, \sigma\mathfrak{J}_l), \quad (\text{Б.3})$$

где полагаем, что $\sigma\mathfrak{J}_i = \mathfrak{J}_{\sigma(i)}$ или $\sigma\mathfrak{J}_i = \mathfrak{J}_{\sigma(i)}^+$ в зависимости от того, меняет $\sigma \in G(\Gamma)$ поляризацию ребра r_i или нет. Очевидно, что все символы (Б.3) отвечают одному и тому же графу $\tilde{\Gamma}$ с точностью до эквивалентности. При этом группа $G(\tilde{\Gamma}^*)$ состоит из преобразований $\sigma \in G(\Gamma)$, не меняющих символ. Отсюда ясно, что множество различных символов, отвечающих одному и тому же графу $\tilde{\Gamma}$, изоморфно множеству левых

смежных классов [4] $G(\Gamma)$ по $G(\tilde{\Gamma}^*)$. Число же таких смежных классов равно отношению порядков соответствующих групп.

После этих замечаний перейдем к выводу тождества (18), составляющего содержание теоремы о скелетных диаграммах. Если скелетный граф Γ имеет L ребер и ν вершин, то его вклад равен

$$W(\Gamma) = K^{\nu-1} n(\Gamma) \int_{\Lambda} \prod_{i=1}^L G(i). \quad (\text{Б.4})$$

Здесь символом $\int_{\Lambda}$ обозначены $L-\nu+1$ сумм по внутренним импульсам, символ i означает импульсный аргумент на i -м ребре графа. При этом предполагается, что нумерация ребер графа Γ сделана вдоль некоторого эйлерова пути C . Подставляя в (Б.4) суммы

$$G = \sum_{\mathfrak{J}} n(\mathfrak{J}) w^*(\Gamma) \quad (\text{Б.5})$$

по всем поляризованным двухвосткам, получим

$$W(\Gamma) = K^{\nu-1} n(\Gamma) \sum_{(\Gamma, C; \mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_l)} \int_{\Lambda} \prod_{i=1}^l n(\mathfrak{J}_i) w^*(\Gamma_i). \quad (\text{Б.6})$$

Здесь компоненты $\mathfrak{J}_n$ в символах $(\Gamma, C, \mathfrak{J}_1, \mathfrak{J}_2, \dots, \mathfrak{J}_l)$ пробегают независимо все поляризованные двухвостки разложения (Б.5). Пользуясь замечанием 3, соберем в сумме (Б.6) вклады, отвечающие одинаковым графам $\tilde{\Gamma}$:

$$W(\Gamma) = \sum_{\tilde{\Gamma}} K^{\nu-1} \left[\frac{G(\Gamma)^{\#}}{G(\tilde{\Gamma}^*)} n(\Gamma) \prod_{i=1}^l n(\mathfrak{J}_i) \right] \int_{\Lambda} \prod_{j=1}^l w^*(\Gamma_j). \quad (\text{Б.7})$$

В сумме (Б.7) символ $\tilde{\Gamma}$ пробегает все неэквивалентные графы, получаемые вставками в скелетный граф Γ всевозможных двухвостков Γ_j . Теперь из (Б.2) и (Б.7) следует нужное нам тождество (18):

$$W(\Gamma) = \sum_{\tilde{\Gamma}} K^{\nu-1} n(\tilde{\Gamma}) \int_{\Lambda} \prod_{i=1}^l w^*(\Gamma_i) \equiv \sum_{\tilde{\Gamma}} w(\tilde{\Gamma}).$$

Список литературы

- [1] В. Н. Лихачев, В. А. Онищук. ТМФ. 1997. Т. 111. № 2. С. 452–461.
- [2] Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков. Введение в теорию квантованных полей. М.: Наука, 1976.
- [3] М. А. Евграфов. Асимптотические оценки и целые функции. М.: Физматгиз, 1962.
- [4] Л. С. Понтрягин. Непрерывные группы. М.: Наука, 1984.

Поступила в редакцию 7.X.1996 г.

V. N. Likhachev, V. A. Onischuk

STOCHASTIC EQUATIONS FOR FLUCTUATING POTENTIALS IN THE DONOR–ACCEPTOR SYSTEMS WITH LOW COMPENSATION

To investigate the stochastic equations for fluctuating potentials in the donor–acceptor systems with low compensations K , the asymptotic perturbation theory is elaborated and correction for the Fermi-level of impurity electrons is calculated. It is shown that despite the low compensation of the two-acceptor local complexes their structure forms the leading term of asymptotic $\delta\mu(K)$.