Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. Г. Козлов, Статистика краевой функции Грина одномерной разупорядоченной системы с бинарным или равномерным диагональным беспорядком, *ТМФ*, 2004, том 140, номер 2, 337–352

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf90>

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: 3.80.253.173

26 апреля 2023 г., 12:29:17

СТАТИСТИКА КРАЕВОЙ ФУНКЦИИ ГРИНА ОДНОМЕРНОЙ РАЗУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ С БИНАРНЫМ ИЛИ РАВНОМЕРНЫМ ДИАГОНАЛЬНЫМ БЕСПОРЯДКОМ

Для одномерной диагонально разупорядоченной цепочки исследована статистика краевой функции Грина (КФГ), построенной по случайной матрице гамильтониана этой системы. Беспорядок предполагается бинарным или равномерным. Показано, что в случае бинарного беспорядка функция распределения КФГ не является аналитической. Предложен простой алгоритм построения этой функции. Для случая равномерного беспорядка функция распределения КФГ вычислена точно на некотором интервале, а для полного ее определения и вычисления усредненной КФГ предложен простой и эффективный метод. Все полученные результаты проверены с помощью прямой компьютерной диагонализации, обнаружено хорошее согласие.

Ключевые слова: разупорядоченная система, случайная матрица, функция Грина, плотность состояний.

1. ВВЕДЕНИЕ, ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

К разупорядоченным обычно относят системы, не имеющие трансляционной симметрии. Так как в реальных физических системах всегда следует ожидать нарушения этой симметрии, то можно сказать, что упорядоченные системы и соответствующие им математические модели являются первым и не всегда достаточным приближением при описании реальных систем. С математической точки зрения задачи, возникающие при рассмотрении разупорядоченных систем, гораздо сложнее, чем аналогичные задачи, соответствующие упорядоченным системам, и характеризуются отсутствием хорошо обоснованных универсальных подходов к их решению. В особенно интересных случаях сильно разупорядоченных систем построение приближенных решений затруднено отсутствием малых параметров. По этим причинам для каждой конкретной задачи, как правило, приходится разрабатывать свой метод решения.

*Всероссийский научный центр “Государственный оптический институт им. С. И. Вавилова”, Санкт-Петербург, Россия. E-mail: gkozlov@photonics.phys.spbu.ru

Задач, решаемых точно, в физике разупорядоченных систем очень мало. Даже предложить более или менее последовательный подход к решению удастся лишь для простейших моделей разупорядоченных систем, две из которых и рассматриваются ниже. Это модели одномерного экситона Френкеля при бинарном и равномерном диагональном беспорядках в приближении ближайшего соседа. Рассмотрим цепочку двухуровневых атомов, в которой расщепление $\varepsilon(r)$ уровней атома с номером r может быть с вероятностью c равно u и с вероятностью $1 - c$ равно $-u$ (бинарный беспорядок) или равномерно распределено в интервале $[-u, u]$ (равномерный беспорядок). Между атомами имеется взаимодействие Δ , способное переносить возбуждение с одного атома на другой, причем это взаимодействие отлично от нуля только для ближайших соседей. Если число атомов в цепочке равно N , то задача сводится к исследованию случайной матрицы гамильтониана $\mathbf{H}$ [1] с элементами

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

Представляет интерес любая проверенная нетривиальная информация о спектре и собственных векторах этой матрицы. Обычно изучается плотность состояний этой матрицы, в которой диагональные элементы $\varepsilon(r)$ считаются независимыми случайными величинами, имеющими функцию распределения $P(\varepsilon)$. Для бинарного и равномерного беспорядков эта функция имеет вид соответственно

$$P(\varepsilon) = c\delta(\varepsilon - u) + (1 - c)\delta(\varepsilon + u), \quad (2a)$$

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

Как правило, эту задачу рассматривают в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$. Заметим, что задача, соответствующая бинарному беспорядку, возникает при рассмотрении колебательного спектра изотопически разупорядоченной цепочки, причем существует реальная физическая система [2], [3], описываемая этой моделью. Задачи этого типа рассматривались Дайсоном [4], которому удалось получить точное решение для некоторого специального (не бинарного и не равномерного) вида беспорядка. В настоящей работе подход Дайсона применяется к случайным матрицам с бинарным и равномерным беспорядками.

Всюду ниже мы будем исследовать функцию Грина, построенную по гамильтониану (1),

$$\mathbf{G} = (E - \mathbf{H})^{-1}. \quad (3)$$

Во всей матрице функции Грина (3) для рассматриваемых задач оказывается особенно важным элемент $G_{N,N}$, который мы будем называть *краевой функцией Грина* (КФГ). Для расчета плотности состояний необходима *объемная функция Грина* — достаточно произвольный элемент $G_{r,r}$ такой, что узел r находится настолько далеко от краев цепочки, что среднее $\langle G_{r,r} \rangle \equiv \langle g(E) \rangle$ не зависит от номера r . КФГ обладает следующим

свойством [1]. Рассмотрим цепочку из N атомов, КФГ которой обозначим γ и добавим к ней еще один атом с расщеплением ε . КФГ полученной таким образом цепочки из $N + 1$ атомов обозначим $\tilde{\gamma}$. Тогда имеет место следующее соотношение:

$$\tilde{\gamma} = \frac{1}{E - \varepsilon - \Delta^2 \gamma}. \quad (4)$$

Если известна функция распределения $\rho_N(\gamma)$ для цепочки из N атомов, то функция распределения $\rho_{N+1}(\tilde{\gamma})$ для цепочки из $N + 1$ атомов может быть получена при помощи (4). При $N \rightarrow \infty$ эти функции должны совпадать, т.е. $\rho_N(\gamma) = \rho_{N+1}(\gamma) \equiv \rho(\gamma)$, что дает следующее уравнение [1] для предельной функции $\rho(\gamma)$:

$$\rho(\gamma)\gamma^2 = \int d\gamma' P\left(E - \Delta^2 \gamma' - \frac{1}{\gamma}\right) \rho(\gamma'). \quad (5)$$

Решение этого уравнения в ряде случаев может быть существенно нерегулярной функцией, на что было указано в работе [5]. Ниже мы увидим, что для случая бинарного беспорядка это действительно так, в отличие от случая равномерного беспорядка, когда решение (5) представляет собой достаточно “хорошую” функцию. Исследование КФГ представляет интерес, главным образом, потому, что, зная функцию распределения КФГ $\rho(\gamma)$, можно вычислить усредненную объемную функцию Грина по любой из следующих формул [1]:

$$\langle g(E) \rangle = \int \frac{dx dy d\varepsilon \rho(x) \rho(y) P(\varepsilon)}{E - \varepsilon - \Delta^2(x + y)}, \quad (6a)$$

$$\langle g(E) \rangle = \frac{d}{dE} \int d\gamma \rho(\gamma) P(\varepsilon) \ln(E - \varepsilon - \gamma \Delta^2). \quad (6b)$$

Для случая бинарного (2а) или равномерного (2б) беспорядков уравнение (5) имеет соответственно вид

$$\rho(\gamma)\gamma^2 \Delta^2 = c \rho\left(\frac{E - u - \gamma^{-1}}{\Delta^2}\right) + (1 - c) \rho\left(\frac{E + u - \gamma^{-1}}{\Delta^2}\right), \quad (7a)$$

$$2u\gamma^2 \rho(\gamma) = \int_{l(\gamma)}^{h(\gamma)} \rho(x) dx, \quad h(\gamma) \equiv \frac{E + u - \gamma^{-1}}{\Delta^2}, \quad l(\gamma) = \frac{E - u - \gamma^{-1}}{\Delta^2}. \quad (7b)$$

Основной целью настоящей работы является исследование этих уравнений. Ниже перечислены основные результаты.

В случае бинарного беспорядка:

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

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

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

4. Предлагаемый алгоритм построения $\rho(\gamma)$ позволяет вычислять средние с возможностью их аналитического продолжения по E в область $E < E_c$ и в область спектра гамильтониана (1). Вычислены $\text{Im}\langle\gamma(E)\rangle$ (плотность возбуждений на краю цепочки) и $\text{Im}\langle g(E)\rangle$ (плотность состояний). Результаты согласуются с результатами, полученными с помощью компьютерной диагонализации.

В случае равномерного беспорядка:

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

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

3. Предложен метод построения $\rho(\gamma)$ во всей области определения, который хорошо согласуется с компьютерными расчетами $\rho(\gamma)$. В рамках предложенного метода для усредненной КФГ получено простое замкнутое трансцендентное уравнение, а для границ спектра гамильтониана (1) – аналитическая формула. Вычисленные усредненная КФГ и границы спектра хорошо согласуются с результатами, полученными компьютерной диагонализацией и усреднением.

2. БИНАРНЫЙ БЕСПОРЯДОК. ПОСТРОЕНИЕ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КФГ

КФГ представляет собой случайную величину, значения которой можно получать следующим образом. Возьмем произвольную цепочку, КФГ которой равна γ_0 , и будем добавлять к ней атомы со случайным расщеплением ε . При этом изменение КФГ можно представить как последовательность отображений (4),

$$\gamma_{n+1} = \frac{1}{E - \varepsilon - \Delta^2 \gamma_n}, \quad (8)$$

со случайным параметром ε . При бесконечном повторении этого отображения величины γ_n распределяются в соответствии с искомой функцией распределения $\rho(\gamma)$. Если

бы параметр ε не флуктуировал, а был бы равен u (или $-u$), то отображение (8) быстро сошлось бы к величинам γ_- (или γ_+), определяемым уравнением

$$\gamma_{\pm} = \frac{1}{E \pm u - \Delta^2 \gamma_{\pm}},$$

решение которого задается формулой

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

Нетрудно показать (графически, как это обычно делается при изучении аттракторов отображений типа (8)), что если при некотором n величина γ_n оказалась заключенной между γ_- и γ_+ , то γ_{n+1} оказывается также заключенной в этом интервале, если $-u < \varepsilon < u$. Так как γ_n рано или поздно всегда попадет в интервал $[\gamma_+, \gamma_-]$, то и все следующие γ_m , $m > n$, также попадут в этот интервал. Отсюда можно сделать вывод, что функция $\rho(\gamma)$ не равна нулю только в этом интервале, т.е.

$$\rho(\gamma) \neq 0 \quad \text{при} \quad \gamma \in [\gamma_+, \gamma_-]. \quad (9)$$

Рис. 1

Все сказанное выше в равной степени справедливо для бинарного и равномерного беспорядков. Специфика бинарного беспорядка заключается в том, что внутри интервала $[\gamma_+, \gamma_-]$ можно указать область, где $\rho(\gamma) \equiv 0$. На рис. 1 на плоскости xu приведены графики зависимостей

$$y_{\pm}(x) = \frac{E \pm u - x^{-1}}{\Delta^2}, \quad (10)$$

представляющие собой аргументы функций ρ в правой части (7а), а также прямая $y = x$. Определим $\gamma'_{\pm}$ из уравнений

$$y_{\pm}(\gamma'_{\pm}) = \gamma_{\mp} \quad (11)$$

и построим соответствующие точки так, как это показано на рис. 1. Видно, что если $\gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]$, то $y_-(\gamma) < \gamma_+$ и $y_+(\gamma) > \gamma_-$, т.е. аргументы функций ρ в правой части (7а) не принадлежат отрезку $[\gamma_+, \gamma_-]$, правая часть (7а) обращается в нуль и, следовательно,

$$\rho(\gamma) \equiv 0 \quad \text{при } \gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]. \quad (12)$$

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

Проинтегрируем теперь уравнение (7а), например, по промежутку $[\gamma_+, \gamma'_+]$:

$$\int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x) dx = \frac{1-c}{\Delta^2} \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho \left(\frac{E+u-x^{-1}}{\Delta^2} \right) \frac{dx}{x^2} = (1-c) \int_{\gamma_+}^{\gamma_-} \rho(x) dx = 1-c. \quad (13)$$

Здесь мы воспользовались тем, что аргумент $y_-(\gamma)$ первой функции в правой части (7а) не принадлежит $[\gamma_+, \gamma_-]$ при $\gamma \in [\gamma_+, \gamma'_+]$ и, следовательно, интеграл от первой функции равен нулю. Аналогично получается

$$\int_{\gamma'_-}^{\gamma_-} \rho(x) dx = c. \quad (14)$$

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

$$\rho(\gamma) \approx \begin{cases} c(\gamma_- - \gamma'_-)^{-1}, & \gamma \in [\gamma_-, \gamma'_-], \\ (1-c)(\gamma'_+ - \gamma_+)^{-1}, & \gamma \in [\gamma_+, \gamma'_+], \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (15)$$

Для дальнейшего удобно ввести понятия двух видов *отображений* $\hat{O}_{\pm}$ точек или отрезков. Будем считать, что $x' = \hat{O}_{\pm}x$, если $y_{\pm}(x') = x$. Например, $\hat{O}_+\gamma_- = \gamma'_+$ или $\hat{O}_-\gamma_+ = \gamma'_-$ (рис. 1). Аналогично для отрезков. Если отрезок представлять столбцом, верхний и нижний элементы которого суть верхняя и нижняя границы этого отрезка, то

$$\hat{O}_{\pm} \begin{pmatrix} h \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{O}_{\pm}h \\ \hat{O}_{\pm}l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E \pm u - \Delta^2 h)^{-1} \\ (E \pm u - \Delta^2 l)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (16)$$

Рассуждения, аналогичные приведенным выше для получения условия (12), приводят к следующему утверждению. Если функция $\rho(\gamma)$, определяемая уравнением (7а), обращается в нуль на некотором отрезке $[a, b]$, то она равна нулю также и на двух отрезках, полученных из $[a, b]$ отображениями $\widehat{O}_{\pm}$. Например, равенство нулю $\rho(\gamma)$ на $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ приводит к равенству нулю $\rho(\gamma)$ на отрезках, полученных из него отображениями $\widehat{O}_{\pm}$. На рис. 1 эти отрезки показаны жирными черными линиями, там же стрелками показан графический смысл отображений $\widehat{O}_{\pm}$. Таким образом, применяя отображения $\widehat{O}_{\pm}$ n раз или проходя n этапов, из отрезка $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ мы получим 2^n других, где $\rho(\gamma) \equiv 0$. Назовем эти отрезки *запрещенными* (всего запрещенных отрезков после n этапов будет $2^n + 1$).

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

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

$$\begin{pmatrix} h_i \\ l_i \\ I_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 2^{n+1}. \quad (17)$$

Тогда нетрудно проверить, что $(n + 1)$ -й этап заключается в том, что из этой совокупности разрешенных отрезков получается новая совокупность, состоящая из следующих двух классов. Первый класс получается применением отображения $\widehat{O}_+$ к двум верхним компонентам столбцов совокупности (17) и умножением на $1 - c$ третьего компонента, второй класс – применением отображения $\widehat{O}_-$ к двум верхним компонентам столбцов совокупности (17) и умножением на c третьего компонента, т.е.

$$\begin{pmatrix} \tilde{h}_i \\ \tilde{l}_i \\ \tilde{I}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{O}_+ h_i \\ \widehat{O}_+ l_i \\ (1 - c)I_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (E + u - \Delta^2 h_i)^{-1} \\ (E + u - \Delta^2 l_i)^{-1} \\ (1 - c)I_i \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 2^{n+1}, \quad (18)$$

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

Проверка выполняется по аналогии с формулами (13), (14). Аналогично формуле (15) после n этапов функцию $\rho(\gamma)$ можно приближенно представить в виде

$$\rho(\gamma) = I_i (h_i - l_i)^{-1} \quad \text{при } \gamma \in [l_i, h_i]. \quad (19)$$

Алгоритм (18), (19) в сочетании с начальными условиями

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

Рис. 2

позволяет строить функцию распределения $\rho(\gamma)$ с произвольной точностью. Пример такого построения при $c = 0.5$, $\Delta = 2$, $u = 0.6$, $E = 2\Delta + u$ показан на рис. 2 (для $n = 0, 1, 2, 3$), где также показана функция $\rho(\gamma)$, полученная компьютерным моделированием (для $n = 3$).

Описанная выше процедура последовательного дробления разрешенных отрезков напоминает процедуру построения фрактала. Функцию $\rho(\gamma)$ можно рассматривать как “аттрактор” случайного отображения (8). На рис. 3 показана структура этого “аттрактора”, полученная следующим образом. К “затравочному” значению $\gamma_0 = 0.5(\gamma_+(E_0) + \gamma_-(E_0))$ ($E_0 \equiv 2\Delta + u$) 50000 раз применялось отображение (8), причем параметр ε генерировался случайным образом в соответствии с распределением (2а) (при $c = 0.7$, $\Delta = 2$, $u = 0.6$ (рис. 3а) или $u = 0.2$ (рис. 3б)), а энергия E равномерно изменялась в диапазоне $E_0 < E < 1.1E_0$. Полученные 50000 точек (γ_n, E) строились на плоскости (γ, E) . Плотность точек по вертикали при заданном E определяется функцией $\rho(\gamma)$. Также на рис. 3 показаны граничные линии первых восьми разрешенных отрезков, построенных при помощи алгоритма (18). Из рисунка видно, что при достаточно малом

Рис. 3

беспорядке ($u = 0.2$), существует такое значение энергии E_c , при котором запрещенные отрезки исчезают. Значение E_c определяется из уравнения $\gamma'_+(E_c) = \gamma'_-(E_c)$ или

$$\sqrt{(E_c + u)^2 - 4\Delta^2} - \sqrt{(E_c - u)^2 - 4\Delta^2} = 6u,$$

которое представляет собой условие исчезновения первого запрещенного отрезка (12). Это влечет за собой исчезновение остальных запрещенных отрезков, которые получаются из первого отображениями $\hat{O}_\pm$. Таким образом, при $E < E_c$ описанный выше ал-

горитм построения $\rho(\gamma)$ нуждается в модификации. Это, однако, совершенно не важно для вычисления усредненных КФГ и объемной функции Грина (6а), которые достаточно вычислить при $E > E_c$ и аналитически продолжить на всю комплексную плоскость. Нетрудно показать, что при $u > \Delta/4$ величина E_c становится меньше, чем $2\Delta + u$, т.е. E_c “погружается” в спектр гамильтониана. По-видимому, это “погружение” не связано ни с каким критическим поведением рассматриваемой разупорядоченной системы, однако вопрос этот пока остается открытым. В следующем разделе будут описаны вычисления средних КФГ и объемной функции Грина.

3. БИНАРНЫЙ БЕСПОРЯДОК. УСРЕДНЕННЫЕ КФГ И ОБЪЕМНАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА

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

$$\langle \gamma(E) \rangle = \int_{\gamma_+}^{\gamma_-} \rho(\gamma) \gamma d\gamma \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M I_i (h_i(E) + l_i(E)), \quad M \equiv 2^{n+1}. \quad (20)$$

Функции $h_i(E)$ и $l_i(E)$ аналитичны по E , так как они получаются применением аналитических по E отображений $\hat{O}_{\pm}(E)$ к аналитическим по E функциям $\gamma_{\pm}(E)$. Поэтому описанный выше алгоритм допускает аналитическое продолжение по E и с его помощью усредненная КФГ может быть вычислена при любом E .

Несколько более громоздкое, но аналогичное вычисление объемной функции Грина по формуле (6а) приводит к следующей приближенной формуле:

$$\langle g(E) \rangle \approx \sum_{i,j=1}^M \frac{I_i I_j}{(h_i - l_i)(h_j - l_j)} (c \Phi_{ij}(E - u) + (1 - c) \Phi_{ij}(E + u)), \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_{ij}(z) \equiv \frac{1}{\Delta^4} \{ & [z - \Delta^2(l_i + l_j)] \ln[z - \Delta^2(l_i + l_j)] + \\ & + [z - \Delta^2(h_i + h_j)] \ln[z - \Delta^2(h_i + h_j)] - \\ & - [z - \Delta^2(h_i + l_j)] \ln[z - \Delta^2(h_i + l_j)] - \\ & - [z - \Delta^2(l_i + h_j)] \ln[z - \Delta^2(l_i + h_j)] \}. \end{aligned}$$

На рис. 4а показаны $\text{Im} \langle g(E) \rangle$ (плотность состояний), полученная компьютерной диагонализацией и усреднением по 10000 реализаций (нижний график), и $\text{Im} \langle g(E) \rangle$, полученная в шесть этапов с помощью описанного выше алгоритма по формуле (21) (верхний график). На рис. 4б приведены $\text{Im} \langle \gamma(E) \rangle$ (плотность возбуждений на конце цепочки), полученная компьютерной диагонализацией и усреднением по 10000 реализаций (нижний график), и $\text{Im} \langle \gamma(E) \rangle$, полученная в десять этапов по формуле (20) (верхний график).

Здесь и всюду ниже при компьютерной диагонализации использовались случайные матрицы размером 200×200 . Приведенные на рис. 4а, б зависимости соответствуют случаю сильного беспорядка ($c = 0.5$, $u = 1$, $\Delta = 2$), и функция распределения $\rho(\gamma)$ более или менее однородно заполняет интервал $[\gamma_+, \gamma_-]$. Поэтому достаточно небольшого числа этапов, чтобы получить хорошее согласие. Качество зависимостей, полученных по формулам (20), (21), выше, чем полученных путем численной диагонализации и усреднения, а времени для реализации шести этапов требуется гораздо меньше.

$\text{Im}\langle g(E) \rangle$, $u = 1$, $\Delta = 2$, $c = 0.5$, $n = 6$, 10000 реализаций

$\text{Im}\langle \gamma(E) \rangle$, $u = 1$, $\Delta = 2$, $c = 0.5$, $n = 10$, 10000 реализаций

$\text{Im}\langle g(E) \rangle$, $u = 1$, $\Delta = 2$, $c = 0.9$, $n = 6$, 3000 реализаций

Рис. 4

Согласие несколько ухудшается при переходе к более упорядоченной системе $c = 0.9$, $u = 1$, $\Delta = 2$, (см. рис. 4в, где изображена плотность состояний $\text{Im}\langle g(E) \rangle$). В этом

случае разрешенные отрезки остаются теми же, что и в предыдущем случае, и требуется большее количество этапов, чтобы сместить максимум $\rho(\gamma)$ к γ_- . Поэтому описанный алгоритм особенно эффективен при расчете сильно разупорядоченных цепочек.

4. ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КФГ ПРИ РАВНОМЕРНОМ БЕСПОРЯДКЕ

Как отмечалось выше, при равномерном беспорядке функция $\rho(\gamma)$ отлична от нуля только при $\gamma \in [\gamma_+, \gamma_-]$ (обозначения те же, что и в разделе 2). Если γ такова, что верхний предел интегрирования $h(\gamma)$ в соотношении (7б) больше γ_- , а нижний $l(\gamma)$ меньше γ_+ (этому соответствует $\gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]$, см. рис. 1), то интеграл в (7б) обращается в единицу и, следовательно,

$$\rho(\gamma) = \frac{1}{2u\gamma^2} \quad \text{при } \gamma \in [\gamma'_+, \gamma'_-]. \quad (22)$$

Теперь допустим, что γ такова, что $\gamma'_+ < h(\gamma) < \gamma'_-$, т.е. верхний предел интегрирования $h(\gamma)$ в (7б) находится в области, где функция $\rho(\gamma)$ известна точно из (22). При этом $l(\gamma) < \gamma_+$. Следовательно, интегрирование в (7б) от γ'_+ до $h(\gamma)$ может быть выполнено в явном виде,

$$\rho(\gamma) = \frac{1}{2u\gamma^2} \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x) dx + \frac{1}{4u^2\gamma^2\gamma'_+} - \left(\frac{\Delta}{2u}\right)^2 \frac{1}{(E+u)\gamma^2 - \gamma} \quad (23)$$

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

$$S_+ \equiv \int_{\gamma_+}^{\gamma'_+} \rho(x) dx. \quad (24)$$

Аналогично можно показать, что если γ такова, что $\gamma'_+ < l(\gamma) < \gamma'_-$, т.е. нижний предел интегрирования $l(\gamma)$ в (7б) находится в области, где функция $\rho(\gamma)$ известна точно из (22), то

$$\rho(\gamma) = \frac{S_-}{2u\gamma^2} - \frac{1}{4u^2\gamma^2\gamma'_-} + \left(\frac{\Delta}{2u}\right)^2 \frac{1}{(E-u)\gamma^2 - \gamma} \quad (25)$$

при $\gamma'_+ < l(\gamma) < \gamma'_-$, где константа

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

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

Условие нормировки функции $\rho(\gamma)$

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

и определения (11) дают следующее соотношение между S_- и S_+ :

$$S_+ + S_- = \frac{\Delta^2}{2u}(\gamma_- - \gamma_+). \quad (26)$$

Продолжая аналогичные построения, можно убедиться в том, что функция $\rho(\gamma)$ может быть определена на отрезках, полученных из $[\gamma'_+, \gamma'_-]$ отображениями $\widehat{O}_\pm$ с точностью до все возрастающего числа констант.

Проинтегрируем теперь уравнение (76) от γ_+ до γ'_+ . При этом в правой части получим S_+ . Интегрируя левую часть по частям, нетрудно показать, что S_+ связана с усредненной КФГ следующим соотношением:

$$\int_{\gamma_+}^{\gamma_-} x\rho(x) dx = \langle \gamma(E) \rangle = \gamma_- - \frac{2u}{\Delta^2} S_+. \quad (27)$$

Рис. 5

Ниже мы опишем приближенный метод расчета S_+ . Для этого сделаем следующее предварительное замечание. Из уравнения (76) для равномерного беспорядка следует, что функция $\rho(\gamma)$ непрерывна, а из приведенных выше соображений вытекает, что она аналитична на некоторой совокупности неперекрывающихся отрезков. Таким образом, функция $\rho(\gamma)$ в данном случае не является столь сложной, как в случае бинарного беспорядка, и есть все основания надеяться, что ее можно аппроксимировать несколькими гладкими функциями. В качестве таких функций мы возьмем функции (22), (23), (25). Пусть $\gamma \approx \gamma_+$. Из сказанного выше вытекает, что в этом случае $\rho(\gamma)$ естественно аппроксимировать формулой (23), тем более что при некоторых γ эта формула является

точной. При $\gamma \approx 0.5(\gamma_+ + \gamma_-)$ функция $\rho(\gamma)$ определяется формулой (22), а при $\gamma \approx \gamma_-$ – формулой (25). Зависимости (22), (23), (25) могут пересекаться с осью X и друг с другом. Обозначим через γ_1 точку пересечения функции (23) с осью X , через γ_2 точку пересечения функций (23) и (22), через γ_3 точку пересечения функций (22) и (25) и через γ_4 точку пересечения функции (25) с осью X и построим функцию $\rho(\gamma)$, задавая ее на отдельных отрезках формулами (22), (23), (25),

$$\rho(\gamma) = \begin{cases} \text{формула (23)}, & \gamma \in [\gamma_1, \gamma_2], \\ \text{формула (22)}, & \gamma \in [\gamma_2, \gamma_3], \\ \text{формула (25)}, & \gamma \in [\gamma_3, \gamma_4], \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (28)$$

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

$$S_+ = \int_{\gamma_1}^{\gamma'_+} \rho(x) dx$$

позволяет получить для S_+ следующее трансцендентное уравнение:

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

Это уравнение вместе с (26) и (11) позволяет определить S_- и S_+ и построить $\rho(\gamma)$ в виде (28). Типичный результат приведен на рис. 5 (гладкая кривая), где также показана функция $\rho(\gamma)$, полученная компьютерным моделированием. Параметры $u = 1.4$, $\Delta = 2$, $E = 2\Delta + u$. Пользуясь формулой (27), нетрудно получить уравнение, неявно определяющее КФГ:

$$\langle \gamma \rangle = \frac{1}{2u} \ln \frac{E + u - \Delta^2 \langle \gamma \rangle}{E - u - \Delta^2 \langle \gamma \rangle}. \quad (29)$$

Это уравнение дает точные ответы в предельных случаях $u = 0$ и $\Delta = 0$ и хорошо описывает компьютерные результаты при произвольных u и Δ . На рис. 6 приведен график функции $\text{Im} \langle \gamma(E) \rangle$, полученный с помощью формулы (29) для $u = \Delta = 2$ (гладкая кривая), и график этой же функции, полученный для 5000 реализаций усреднения с помощью компьютерной диагонализации. Уравнение (29) также позволяет в явном виде вычислить границы спектра гамильтониана (1) при равномерном беспорядке (они, очевидно, симметричны). Граничной энергии соответствует исчезновение вещественного решения уравнения (29) – в области спектра КФГ имеет мнимую часть. Несложный графический анализ уравнения (29) показывает, что вещественное решение пропадает, когда его левая и правая части касаются в точке пересечения, т. е.

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \ln \frac{E + u - \Delta^2 x}{E - u - \Delta^2 x} &= 2u, \\ 2ux &= \ln \frac{E + u - \Delta^2 x}{E - u - \Delta^2 x}. \end{aligned} \quad (30)$$

Рис. 6

Рис. 7

Из этой системы уравнений определяется граничная энергия для случая равномерного беспорядка

$$E_0 = \sqrt{u^2 + \Delta^2} + \frac{\Delta^2}{2u} \ln \frac{\sqrt{u^2 + \Delta^2} + u}{\sqrt{u^2 + \Delta^2} - u}. \quad (31)$$

На рис. 7 приведено сравнение этой формулы с компьютерным расчетом при изменении величины беспорядка u для $\Delta = 2$. Гладкая кривая соответствует формуле (31), прямая – формуле (32) (см. ниже), “шумящая кривая” – результат компьютерного моделирования для случая равномерного беспорядка. Видно, что при большой величине беспорядка u ширина спектра не зависит от Δ – беспорядок “подавляет” межатомное взаимодействие Δ . В этом проявляется отличие равномерно разупорядоченной системы от бинарно разупорядоченной, для которой граница спектра определяется формулой

$$E_0 = 2\Delta + u, \quad (32)$$

и включение взаимодействия Δ вызывает смещение спектра 2Δ при любом беспорядке.

Список литературы

- [1] И. М. Лифшиц, С. А. Гредескул, Л. А. Пастур. Введение в теорию разупорядоченных систем. М.: Наука, 1982.
- [2] М. В. Белоусов, Д. Е. Погарев. Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 36. № 5. С. 152.
- [3] М. В. Белоусов, Б. Е. Вольф, Е. А. Иванова. Письма в ЖЭТФ. 1983. Т. 38. № 8. С. 376.
- [4] F. Dyson. Phys. Rev. 1953. V. 92. P. 1331.
- [5] H. Schmidt. Phys. Rev. 1957. V. 105. P. 425.

Поступила в редакцию 21.VII.2003 г.,
после доработки 16.X.2003 г.