

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Фізичний факультет

Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М.Ліфшиця

«Допущено до захисту»

Оцінка « _____ »

Зав. кафедри теоретичної фізики імені

Голова ЕК _____

академіка І.М.Ліфшиця

« ____ » червня 2024 р.

доц. Рашба Г.І. _____

« ____ » червня 2024 р.

Клімов Максим Валерійович

**Вплив неупорядкованості в зовнішньому електричному
потенціалі на транспортні властивості електронів в
одновимірних ланцюгах**

Кваліфікаційна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Бакалавр» за напрямом підготовки
104 - «фізика та астрономія»
освітньо-професійна програма
«фізика»

Рецензент - доктор. фіз.-мат. наук, про-
фесор (сумісник) кафедри теоретичної
фізики імені академіка І. М. Ліфшиця
О.С. Ковальов

Науковий керівник - доктор фіз.-мат. наук,
професор (сумісник) кафедри теоретичної
фізики імені академіка І. М. Ліфшиця
В.В. Славін

Харків 2024

Анотація

Розглянуто транспорт електронів в одновимірній неупорядкованій ґратці. Досліджувалась межа низької густини електронів, де кількість електронів набагато менша за кількість вузлів решітки. У цьому випадку можна знехтувати всіма ефектами, пов'язаними з електрон-електронними взаємодіями (тобто кулонівські взаємодії, спин-спінові взаємодії). Гамільтоніан цієї моделі має вигляд:

$$\hat{H} = - \sum_n (t_n \hat{c}_n^+ \hat{c}_{n+1} + t_n^* \hat{c}_{n+1}^+ \hat{c}_n) + \sum_n U_n \hat{c}_n^+ \hat{c}_n.$$

тут n перераховує вузли решітки; c_n^+ і c_n — оператори народження/знищення електрона на вузлі n ; t_n константи інтегралу перекриття і U_n константи взаємодії електрона з ґраткою. Параметри t_n і U_n вважаються випадковими. Їх випадковість зумовлена неупорядкованістю положень вузлів решітки. Добре відомо, що в одновимірних системах випадковість U_n (або t_n) призводить до локалізації електрона. Отже, транспорт електронів неможливий навіть у разі довільного слабкого безладу.

Розглянуто модель, де і U_n , і t_n є випадковими, але не незалежними. Показано, що кореляції між випадковими U_n і t_n можуть призводити до делокалізації станів електрона. У результаті стає можливим транспорт електронів. Залежно від типу кореляції між U_n і t_n виявлено кілька режимів транспортування: субдифузійний, дифузійний і супердифузійний. Встановлено області існування цих режимів.

Key words: Correlated disorder, tight-binding model, delocalization of states, transport classification

Зміст

1	Аналітичний огляд літератури	4
2	Вступ	8
3	Гамільтоніан моделі	9
4	Результати та обговорення	14
5	Показник Ляпунова	20
6	Висновки	31

1 Аналітичний огляд літератури

У своїй роботі Андерсон [1] показав, що для достатньо малих концентрацій атомів або, інакше кажучи, для достатньо малих потенціальних енергій взаємодії між атомами - такими, що зникають швидше за $\frac{1}{r^3}$ при великих r та які не перевищують певне критичне значення V_c - транспорт мобільних сутностей, таких як електрон або спин у сенсі спінових хвиль, стає неможливим і хвильові функції, залишаючись кінцевими на вузлі початкової локалізації, залишаються обмеженими досить малим радіусом локалізації. При енергіях взаємодії між вузлами V_c такими, що пропорційні $\frac{1}{r^3}$, показано, що транспорт може бути значно повільнішим, ніж передбачалось в попередніх роботах.

У першій частині статті [2] Голштейн описує модель руху поляронів. Розглядається одновимірна молекулярно-кристалічна структура, у якій є один зайвий електрон (чи дірка). Кожен вузол структури має один ступінь свободи для коливань, який представлений відхиленням інтернуклеарної відстані від рівноважного стану. Основна увага приділяється руху електрона, що розглядається за допомогою методу щільного зв'язку. Хвильова функція задається як суперпозиція локальних молекулярних функцій. Електронно-граткова взаємодія виникає через лінійну залежність енергії електрона від зміщення молекули на даному вузлі, що призводить до можливості захоплення електрона. У другій частині розглядається випадок, коли енергія перекриття для електронів є малою величиною. У нульовому порядку електрон локалізовано на певному сайті, а вібраційний стан системи визначається набором квантових чисел. За наявності ненульової енергії, що перекривається, виникають переходи електрона на сусідні вузли, які можуть бути або "діагональними" (без зміни квантових чисел), або "недіагональними" (зі зміною квантових чисел).

Стаття Фюрстенберга [3] присвячена дослідженню статистичних і ма-

тематических аспектов случайных процессов, зокрема, добутку випадкових матриць. Основну увагу приділено теоремам, пов'язаним з умовами схожості та розподілу таких добутків. У статті представлені додатки цієї теореми до вивчення марковських ланцюгів і стаціонарних розподілів, а також аналіз стійкості динамічних систем з використанням випадкових матриць.

Робота [4] визначає феноменологічний підхід до суперіонних провідників. Госар досліджує механізм та умови, за яких іони у твердому тілі можуть демонструвати високу рухливість, аналогічну рідинам. Стаття фокусується на теоретичних аспектах суперіонної провідності, таких як фазові переходи та динаміка іонів, та пропонує моделі для пояснення поведінки суперіонних матеріалів. Цей аналіз важливий для розробки та розуміння матеріалів з високими іонними провідними властивостями, які використовуються в електрохімічних пристроях та батареях.

Ця стаття [5] представляє теоретичний аналіз спектру збудження доволанцюгових полієнів, особливо зосереджуючись на поліацетилені. Внаслідок подвійної виродженості основного стану димеризованого ланцюга дослідження показує, що елементарним збудженням відповідають топологічні солітони, які можуть існувати в трьох зарядових станах (нейтральному, позитивному та негативному). Нейтральний солітон має спин в половину, а заряджені солітони мають нульовий спин. У статті розраховано різні властивості цих солітонів, включаючи їх енергію утворення, довжину, масу, енергію активації руху та електронні властивості, і порівняно ці результати з експериментальними даними. Дослідження підкреслює роль солітонів як фундаментальних збуджень у поліацетилені та обговорює їх вплив на електричні та магнітні властивості матеріалу.

В книзі [6] зроблений значний вклад у розуміння структурних і динамічних властивостей неупорядкованих систем, запропоновані нові методи їх аналізу та відкриті шляхи для подальших досліджень у цій галузі, в частині, встановлення умов, при яких відбувається локалізація хвильових

функцій в неупорядкованих системах і описання залежності спектральних властивостей від параметрів системи.

У цій статті [8] розглядаються транспортні властивості систем, які описуються випадковим гамільтоніаном у моделі близького зв'язку, і досліджується локалізація та динамічна поведінка хвильових пакетів у таких середовищах. Зроблен акцент на появі критичних енергій у спектрі, де показник Ляпунова звертається в нуль, що призводить до динамічної делокалізації. У статті представлені чисельні результати для моделей із випадковими та квазіперіодичними потенціалами, що показують вплив дальнього порядку та кореляції на транспортні властивості. Особлива увага приділяється моделям випадкового паліндрому з властивостями обмеженого проміжку в одній букві, що ілюструє, як такі структури впливають на явища транспорту. У дослідженні використовується чисельне моделювання, щоб продемонструвати зростання другого моменту хвильових пакетів і дає уявлення про основну фізику неупорядкованих систем.

Стаття де Олівейри і Прадо [10] досліджує спектральні та локалізаційні властивості одновимірною дискретного оператора Дірака з потенціалами Бернуллі. У роботі розглядається модель, в якій оператор Дірака використовує випадкові потенціали, які приймають два значення без кореляцій. Автори показали, що нерелятивістський ліміт відповідає одновимірній дискретній моделі Шредінгера. Для випадкових потенціалів спектр оператора Бернуллі є чисто точним для всіх значень маси, в той час як у випадку нульової маси спостерігається динамічна ділокалізація для певних значень енергії. Масивні випадки демонструють динамічну локалізацію (за рахунок деяких додаткових значень енергії). У статті також порівнюються динамічні моменти для різних мас, особливо випадків з нульовою і ненульовою масою в моделях Бернуллі.

У цій статті [11] досліджуються спектральні властивості майже оператора Мат'є, який є фундаментальною моделлю у вивченні квазікристалів

і переходів метал-ізолятор. Житомирська досліджує перехід між металевою (провідною) та ізоляційною (непровідною) фазами як функцію параметрів моделі. Робота ґрунтується на попередніх математичних дослідженнях і використовує передові методи для характеристики природи спектра, особливо зосереджуючись на виникненні критичних енергій, де показник Ляпунова дорівнює нулю. Така поведінка пов'язана з динамічною делокалізацією, яка є ключовим аспектом переходу метал-ізолятор. Дослідження містить точні аналітичні докази та детальний аналіз умов, за яких відбуваються ці переходи. Стаття [9] досліджує спектральні властивості одновимірних квазіперіодичних операторів Шредінгера. Житомирська розглядає моделі, що використовують потенціали, що виникають у квазікристалах та інших системах із квазіперіодичним порядком. Основна увага приділяється аналізу локалізації та неперервним спектрам; автор розвиває теорію, що пов'язує квазіперіодичність із критичною поведінкою спектру. Використовуються методи спектрального аналізу для вивчення квазіперіодичних систем, що має важливе значення для розуміння електронних властивостей квазікристалів.

У статті [12] обговорюється транспортна поведінка в одновимірній дискретній моделі Дірака з безладом. В.В. Славін і Ю.В. Савін аналізують режими супердифузії, що виникає при різних комбінаціях масах частинок та амплітуд потенціалу. Особлива увага приділяється випадку випадкових мас, де встановлено відсутність локалізації. Показано, що за певних умов параметри системи забезпечують супердифузний транспорт.

2 Вступ

Відомо, що в одновимірних (1D) системах з випадковим потенціалом $U(r)$ (де r – координата) або з випадковими інтегралами перекриття $t(r)$ локалізація квантових станів має місце [1, 7, 6] для досить широкого класу U і t . Це означає, що всі одночастинні хвильові функції локалізовані на деякій ділянці скінченного розміру, що називається радіусом локалізації R , а отже, транспортування в таких системах неможливе. На прикладі транспорту електронів це означає, що передача енергії, спінова хвиля, передача інформації неможливі через одновимірні дроти з неупорядкованим розподілом іонів, що утворюють ґратку даного твердого тіла. Якщо розглянути ланцюг атомів кінцевої довжини N , і якщо $R \gtrsim N$, то ефекти, що пов'язані з локалізацією, можуть бути не виявлені при вимірюваннях. Як приклад можна навести хвилеводи, які з високою точністю відображають одновимірні системи з неідеальною, неупорядкованою, поверхнею.

Точні критерії для $U(r)$ і $t(r)$, що гарантують локалізацію квантових станів, наступні. Нехай $U(r)$ і $t(r)$ випадкові з функціями розподілу f і g :

1. Просторові кореляції повинні бути відсутніми: $Cov[V(r), V(r')] = Cov[t(r), t(r')] = \delta(r, r')$,
 $Cov[V(r), t(r')] = 0$, де $Cov[x, y] = \langle x, y \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle$
2. Розподіли повинні бути неперервними: $f(z), g(z) > 0 \forall z \in (-\infty, \infty)$
3. Розподіли повинні бути ідентичними: $f(U(r)) = f(U(r')), g(t(r)) = g(t(r'))$

Доведення теорем (1)-(3) є простим суттєво у випадку дискретних (ґраткових) моделей, де позиція частинки пов'язана з позицією вузла ґратки r_n , $n = 1, 2, \dots$. Тому основна частина досліджень, що стосуються одночастинкової локалізації, здійснюється в рамках дискретних моделей.

Порушення будь-якої з цих умов робить транспорт можливим, але не гарантує його існування. У кожному випадку необхідно вирішувати відповідну задачу.

Наприклад, у статтях [7, 9, 11] в рамках дискретного рівняння Шредингера розглядався випадок наявності кореляції між U і t , тобто порушення вимоги {1}. В результаті для певної комбінації U і t локалізація була відсутня і відбувався транспорт електронів.

У [10, 8, 12] розглядалася 2-зонна модель (дискретне рівняння Дірака) з димерними кореляціями потенціалу U та дискретним розподілом Бернуллі $f(U)$, тобто випадок порушення вимоги {2}. Як і у випадку вище, для певної комбінації параметрів U локалізація відсутня і відбувається транспорт електронів.

Моделі з порушенням умови {3} складно реалізовувати на практиці і тому вони рідко вивчаються.

3 Гамільтоніан моделі

У нашому дослідженні одночастинний одномірний дискретний гамільтоніан був обраний у вигляді:

$$\hat{H} = - \sum_n (t_n \hat{c}_n^+ \hat{c}_{n+1} + t_n^* \hat{c}_{n+1}^+ \hat{c}_n) + \sum_n U_n \hat{c}_n^+ \hat{c}_n. \quad (3.1)$$

Тут індекс n перераховує вузли решітки; $\hat{c}_n^+$ і $\hat{c}_n$ — оператори створення/знищення безспінових ферміонів на вузлі n , t_n — константи стрибків, а U_n — потенціал у вузлі n .

Розлад у U_n і t_n викликаний невпорядкованістю упозицій вузлів решітки:

$$r_n = na_0 + x_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2)$$

Тут a_0 — відстань між найближчими вузлами ідеальної (незбуреної) ре-

шітки, а x_n є випадковими величинами, так що: $-ca_0 \leq x_n \leq ca_0$. У всіх розрахунках $a_0 = 1$. Константу $0 \leq c \leq 1/2$ можна розглядати як параметр неупорядкованості. Такий вибір c дозволяє нам уникнути перекривання позицій r_n вузла решітки.

Такий безлад може бути викликаний наявністю дефектів, домішок або фононів. Оскільки типові частоти фононів ω_{ph} набагато менші за частоти стрибків електронів ω_{el} , можна вважати деформації решітки x_n як *статичні* випадкові величини. Якщо так, то U_n описує електрон-фононну взаємодію на вузлі, і в рамках моделі Голштейна [2] це можна записати так:

$$U_n \sim (\hat{a}_n^+ + \hat{a}_n) = U_0 + G(x_{n+1} - x_{n-1}), \quad G, U_0 \in \mathbb{R}, \quad G, U_0 \geq 0, \quad (3.3)$$

де $\hat{a}_n^+$, $\hat{a}_n$ — оператори створення/знищення фононів на місці n (див., наприклад, [4, 5, 7]), U_0 і G — деякі константи.

Тунельні інтеграли були обрані в досить загальному вигляді:

$$t_n = t(|r_{n+1} - r_n|) = Ae^{-b|r_{n+1} - r_n|},$$

де A і b — деякі константи. У межах слабого безладу ($c \ll 1$) можна розкласти t_n і в лінійному наближенні отримаємо:

$$t_n = V - \Gamma(x_{n+1} - x_n).$$

де константи $V, \Gamma \in \mathbb{C}$. Тут і далі ми будемо дотримуватися позначення з [7]. Отже, тунельні інтеграли t_n можна записати так:

$$t_n = \sqrt{|V|^2 + |\Gamma|^2(x_{n+1} - x_n)^2 - 2|V||\Gamma|(x_{n+1} - x_n)|\cos(\theta)}e^{i\phi_n}, \quad (3.4)$$

$$\operatorname{tg}(\phi_n) = \operatorname{Im} t_n / \operatorname{Re} t_n. \quad (3.5)$$

Доведемо, що комплексні фази ϕ_n не впливають на наші результати і їх можна опустити.

Тридіагональна ермітова матриця $\hat{H}$ (3.1) може бути приведена до симетричної (дійсної) форми $\hat{H}'$ за допомогою унітарного перетворення:

$$\hat{\tilde{H}} = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U}, \quad (3.6)$$

де унітарна матриця $\hat{U}$ є діагональною:

$$U_{11} = 1, \quad U_{nn} = e^{-i \sum_{k=1}^{n-1} \alpha_k}, \quad n = 2, 3, \dots$$

Тут α_k — комплексні фази недіагональних елементів (3.4), (3.5).

Нехай $|\Psi(x_n, t)\rangle$ є розв'язком залежного від часу рівняння Шредінгера з гамільтонівським $\hat{H}$ (3.1) і $|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle$ — відповідний розв'язок рівняння Шредінгера з гамільтоніаном $\hat{H}'$ (3.7), (3.6).

Покажемо, що унітарне перетворення не впливає на моменти $m^{(k)}(t)$ (4.3), тобто:

$$m^{(k)}(t) = \langle \Psi | (\hat{x})^k | \Psi \rangle = \langle \tilde{\Psi} | (\hat{x})^k | \tilde{\Psi} \rangle, \quad ((\hat{x})^k)_{\alpha, \beta} = \alpha^k \delta_{\alpha, \beta}$$

і, отже, не впливають на $D(t)$ (4.2).

Відповідно до визначення

$$m^{(k)}(t) = \sum_n (x_n)^k |\Psi(x_n, t)|^2$$

Відношення між $|\Psi\rangle$ і $|\tilde{\Psi}\rangle$ таке:

$$\Psi_j = \sum_{\alpha=1}^N U_{j,\alpha} \tilde{\Psi}_\alpha.$$

Отже,

$$m^{(k)} = \sum_{j=1}^N (x^k)_{j,j} \Psi_j \Psi_j^* = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha} U_{j,\beta}^* \tilde{\Psi}_\alpha (\tilde{\Psi}_\beta)^*$$

Оскільки $\hat{U}$ є унітарним, $U_{j,\beta}^* = U_{\beta,j}^{-1}$. Таким чином,

$$\begin{aligned} m^{(k)} &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha} U_{\beta,j}^{-1} \Psi'_\alpha (\Psi'_\beta)^* = \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N U_{\beta,j}^{-1} (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha} \Psi'_\alpha (\Psi'_\beta)^* = \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N (\hat{x}^k)_{\beta,\alpha} \Psi'_\alpha (\Psi'_\beta)^*, \end{aligned}$$

де

$$(\hat{x}^k)_{\beta,\alpha} = \sum_{j=1}^N U_{\beta,j}^{-1} (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha}$$

— матричні елементи оператора $\hat{x}^k$ у новому базисі. Оскільки $\hat{x}^k$ і $\hat{U}$ діагональні:

$$(\hat{x}^k)_{\beta,\alpha} = \sum_{j=1}^N U_{\beta,j}^{-1} (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha} = \sum_{j=1}^N U_{\beta,j}^{-1} \delta_{\beta,j} (x^k)_{j,j} U_{j,\alpha} \delta_{\alpha,j} = (x^k)_{\beta,\alpha}.$$

Нарешті ми маємо

$$m^{(k)} = \langle \Psi | (\hat{x})^k | \Psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\beta=1}^N (\hat{x}^k)_{\alpha,\beta} \tilde{\Psi}_\alpha (\tilde{\Psi}_\beta)^* = \langle \tilde{\Psi} | \hat{x}^k | \tilde{\Psi} \rangle$$

Отже, замість (3.1) ми будемо вивчати властивості дійснозначного

гамільтоніана $\hat{H}'$, який є тридіагональним з такими ненульовими елементами:

$$\hat{H}_{n,n} = U_n, \quad \hat{H}_{n,n-1} = -|t_{n-1}|, \quad \hat{H}_{n,n+1} = -|t_n| \quad (3.7)$$

Запропонована модель з гамільтоніаном (3.7) подібна до описаних у [7], але виглядає більш реалістичною. Ми визначаємо безлад у термінах випадкових зсувів вузлів ґратки відносно “ідеальних” положень na_0 (див. (3.2)). Модель, описана в [7], визначає безлад у терміні випадкових відстаней між сусідніми вузлами решітки хоста $\Delta_{n,n+1}$. Окрім відмінностей у функціях розподілу (розподіл $\Delta_{n,n+1}$ є розподілом $x_{n+1} - x_n$), наша модель дозволяє нам послідовно вивчати перехід від *слабкого* до *сильного* безладу. Насправді збільшення Γ означає збільшення флуктуації вузлів ґратки відносно “ідеальних” позицій.

Водночас у запропонованій у [7] моделі $\Gamma = 0$ дійсно відповідає впорядкованому ланцюгу, але будь-яким малим, але ненульовим значенням Γ відповідають малим середнім відстаням між сусідніми вузлами. Це, у свою чергу, відповідає *сильному* розладу. Крім того, оскільки $\Delta_{n,n+1} \geq 0 \forall n$ це призводить або до збільшення, або до зменшення всіх інтегралів тунелювання t_n , залежно від значення параметра $\phi - \theta$ (див., наприклад, (2.1) [7]). У нашій моделі t_n може бути більшим або меншим за незбурене значення $t_n = |\Gamma|$ залежно від знака $(x_{n+1} - x_n)$ (див. (3.4)).

У нашій моделі діагональні члени $U_n \sim (x_{n+1} - x_{n-1})$ можуть бути як позитивними, так і негативними: залежно від стиснення або розрідження ланцюга решітки поблизу n -го вузлу цей доданок описує або приріст, або втрату енергії [2]. У моделі, запропонованій у [7] U_n або всі негативні, або всі позитивні.

4 Результати та обговорення

Ми досліджували залежне від часу рішення рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3.7):

$$\hat{H}|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle = i\frac{\partial|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle}{\partial t} \quad (4.1)$$

з такою початковою умовою:

$$|\Psi'(x_n, t = 0)\rangle = \delta(x_n, x_0).$$

Ця умова відповідає локалізації електрона на вузлі з індексом $n = 0$ в момент часу $t = 0$.

Рух електрона означає “розтікання” $|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle$ як функції часу t . Найбільш інформативні характеристики, що описують транспорт електронів в термінах $|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle$ є залежність від часу дисперсії $D(t)$ (див., наприклад, [7, 12]):

$$D(t) = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = m^{(2)}(t) - \left(m^{(1)}(t)\right)^2. \quad (4.2)$$

Тут $m^{(1)}(t)$ і $m^{(2)}(t)$ — відповідні моменти:

$$m^{(k)}(t) = \langle \tilde{\Psi} | (\hat{x})^k | \tilde{\Psi} \rangle. \quad (4.3)$$

Апроксимація $D(t)$ степеневою залежністю

$$D(t) \sim t^\alpha, \quad t \gg 1 \quad (4.4)$$

дозволяє нам встановити наявність (або відсутність) транспорту та, якщо транспорт існує, характер транспорту. Наприклад, $\alpha = 0$ відповідає відсутності транспорту, $0 < \alpha < 1$ — так званий субдифузійний транспорт, $\alpha = 1$ — дифузійний рух, $1 < \alpha < 2$ — супер-дифузійний транспорт і

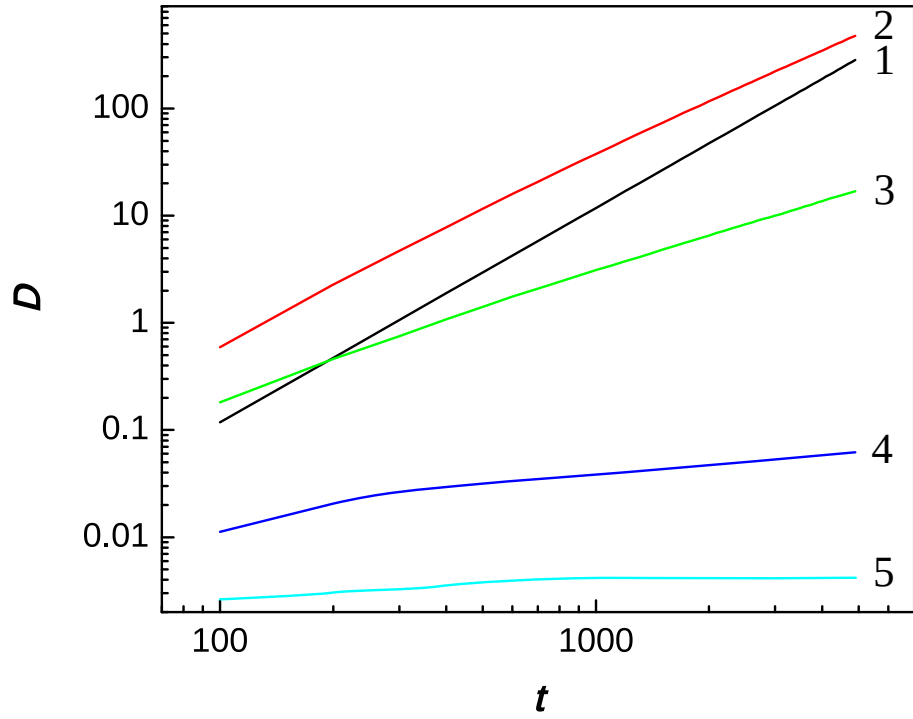


Рисунок 1: Часові залежності дисперсії $D(t)$ (4.2) у подвійному логарифмічному масштабі. У всіх цих розрахунках $|V| = 1$, $G = |\Gamma|$ і кількість вузлів решітки $N = 10000$. Крива 1 (чорна лінія) відповідає впорядкованому ланцюгу і ($G = 0^0$), показник $\alpha = 2$ (див. (4.4)); це випадок балістичного транспорту. Крива 2 (червона лінія) відповідає $G = 0,25$ і $\theta = 90^0$, показник $\alpha = 1,6$; це випадок наддифузійного транспорту. Крива 3 (зелена лінія) відповідає $G = 0,2$ і $\theta = 0^0$, показник $\alpha = 1$; це випадок дифузійного транспорту. Крива 4 (синя лінія) відповідає $G = 0,5$ і $\theta = 0^0$, експонента $\alpha = 0,35$; це випадок субдифузійного транспорту. Крива 5 (блакитна лінія) відповідає $G = 0,75$ і $\theta = 0^0$, експонента $\alpha = 0,01$; це випадок відсутності транспорту.

$\alpha = 2$ відповідає балістичному (вільному) транспорту.

Ми досліджували розв’язок (4.1) чисельно за допомогою методу Рунге-Кутта 8-го порядку. Щоб уникнути впливу крайових ефектів, програма перевіряла ймовірність знайти електрон на останньому (N -тому) вузлі нашого одновимірного неупорядкованого ланцюга. У всіх наших розрахунках $|\tilde{\Psi}(x_N, t)|^2 < \varepsilon = 10^{-10}$ для всіх t у розглянутому діапазоні часу $0 \leq t \leq N/2$.

Для перевірки отриманого результату ми провели додаткові обчислення (4.2) з використанням спектральних даних оператора $\hat{H}$ (див. (3.7)): власні значення $\{\lambda_k\}_{k=1}^N$ і власні вектори: $\{\psi_k(x_n)\}_{k,n=1}^N$. Ці значення також були отримані чисельно. Такий підхід застосовний для досить “маленьких” систем довжиною $N \approx 1000 - 3000$, оскільки час обчислення спектральних даних збільшується як N^3 . З точки зору спектральних даних, хвильову

функцію (4.1) можна записати так:

$$|\tilde{\Psi}(x_n, t)\rangle = \sum_{k=1}^N \psi_k(x_n) \psi_k(x_0) e^{i\lambda_k t}. \quad (4.5)$$

Вектори $\psi_k(x_n)$ є дійсними, а комплексний зв'язок у (4.5) опущений. Результати, отримані за допомогою (4.1) і (4.5), повністю збігаються.

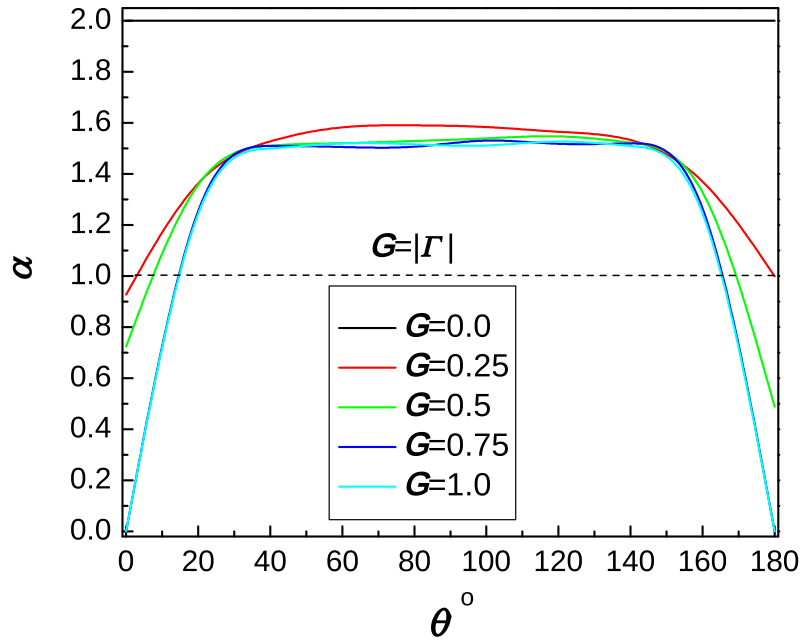


Рисунок 2: Залежності показника α (див. (4.4)) від параметра θ при різних значеннях $G = \Gamma$. У всіх цих розрахунках $V = 1$, а кількість вузлів решітки хоста $N = 20000$.

Типові залежності $D(t)$ для $N = 10000$ і певні комбінації параметрів G , Γ і θ представлені в подвійному логарифмічному масштабі на рис. 1. У всіх цих розрахунках $V = 1$. Як видно, в рамках запропонованої моделі можуть бути реалізовані всі можливі транспортні режими: від локалізації станів до балістичного транспорту.

Апроксимація $D(t)$ виразом (4.4) при $t \gg 1$ дозволяє отримати залежності показника α від тунелювання (V , G , θ) і параметра "стрибків" (Γ). Ці залежності показано на рис. 2. Видно, що в досить широкому діапазоні $0 < G = |\Gamma| \leq 1$ і $20^\circ \lesssim \theta \lesssim 160^\circ$ реалізується наддифузійний транс-

портний режим. Для $0 < \theta \lesssim 20^\circ$ і $160^\circ \lesssim \theta < 180^\circ$ транспортний режим залежить від $G, |\Gamma|$: якщо $0 < G = |\Gamma| < 0,22$ транспорт наддифузний; якщо $G = |\Gamma| > 0,22$ транспорт субдифузний. Якщо $\theta = 0^\circ$ або $\theta = 180^\circ$ і $G = |\Gamma| > 0,5$ транспорт електронів відсутній.

Слід зазначити, що запропонована модель була сформульована в рамках лінійного розкладу внутрішнього потенціалу U_n (3.3) та інтегралів тунелювання t_n (3.4) відносно випадкових деформацій решітки x_n (3.2), тобто в межах $G \sim |\Gamma| \ll |V|$. Тим не менш, ми розширили область G і $|\Gamma|$ до $G, |\Gamma| \leq 1$. Це, звичайно, гамільтоніан (3.7) і розглядається лише як модель.

Як було показано в [7], випадок $G = |\Gamma|$ представляє особливий інтерес через зникнення розсіювання. Отже, цей випадок є найбільш перспективним для транспорту електронів. Вплив G і Γ на $D(t)$ представлено на рис. 3.

Особливий інтерес представляє відсутність транспорту при $\theta = 0^\circ, 180^\circ$ і $G = |\Gamma| > 0,5$ (див. Рис. 4). Щоб зрозуміти причину такої особливості ми провели додаткові дослідження з використанням показника Ляпунова [6, 12]. Застосовуючи теорему Фюрстенберга [3] можна записати показник Ляпунова γ так:

$$\gamma(\lambda) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left(\left\| \prod_{k=n}^1 \hat{T}_k(\lambda) \right\| \right) \quad (4.6)$$

Тут трансфер-матриці $\hat{T}_k$ мають вигляд [6, 3, 12]:

$$\hat{T}_k(\lambda) = \begin{pmatrix} \frac{U_k - \lambda}{|t_n|} & -\frac{|t_{n-1}|}{|t_n|} \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

Що стосується типових значень показника Ляпунова $\gamma \sim R^{-1} \sim D^{-1/2}(t \rightarrow \infty)$, де R — радіус локалізації, нулі γ вказують на можливу делокалізацію станів (точніше, умова $\gamma = 0$ є необхідною, але недостатньою для делокалізації станів, див. напр. [6, 12]).

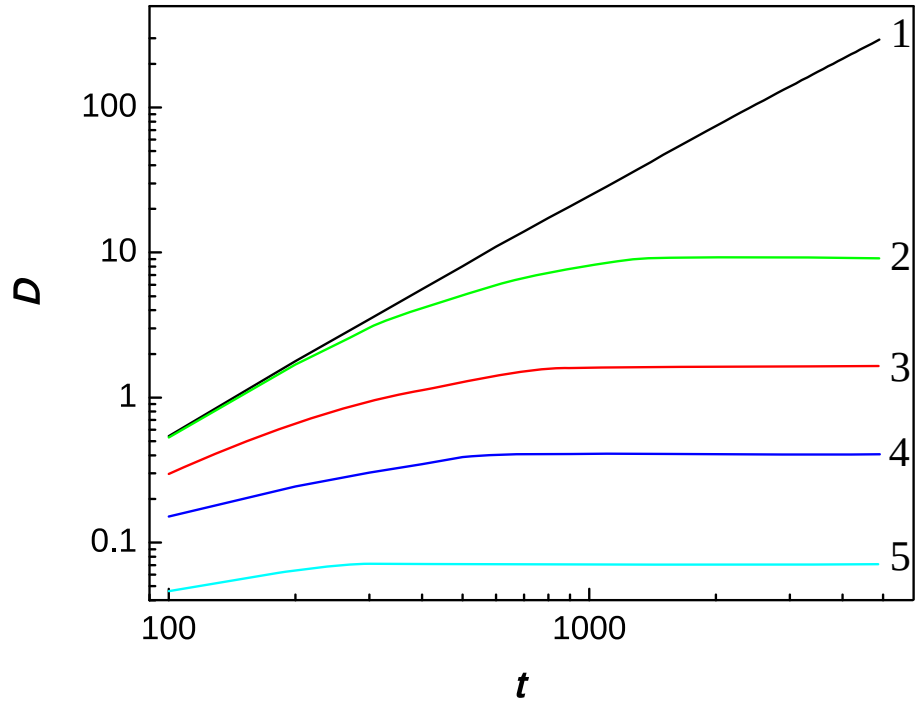


Рисунок 3: Часові залежності дисперсії $D(t)$ (4.2) у подвійному логарифмічному масштабі. У всіх цих розрахунках $|V| = 1$, $\theta = 90^\circ$ і кількість вузлів решітки хоста $N = 10000$. Крива 1 (чорна лінія) відповідає $G = |\Gamma| = 0,5$, експонента $\alpha = 1,5$ (див. (4.4)). Крива 2 (червона лінія) відповідає $G = 0,5$ і $|\Gamma| = 0$, показник $\alpha = 0$. Крива 3 (зелена лінія) відповідає $G = 0$ і $|\Gamma| = 0,5$, показник $\alpha = 0$. Крива 4 (синя лінія) відповідає $G = 0,5$ і $|\Gamma| = 1$, показник $\alpha = 0$; Крива 5 (блакитна лінія) відповідає $G = 1$ і $|\Gamma| = 0,5$, показник $\alpha = 0$;

Результати наших розрахунків представлені на рис. 5. Ми бачимо, що при $\theta = 90^\circ$ поведінка показника Ляпунова γ в околиці кореня $\gamma(0) = 0$ є $\gamma(\lambda) \sim \lambda^\beta$, де $\beta > 1$. У той же час при $\theta = 0^\circ$ і $\theta = 180^\circ$ показник поведінки Ляпунова γ в околі коренів $\gamma(\pm 2) = 0$ дорівнює $\gamma(\lambda) \sim (\pm(2 - \lambda))^\beta$, де $\beta < 1$. У [6, 12] було показано, що такі коренеподібні сингулярності можуть не призводити до делокалізації станів.

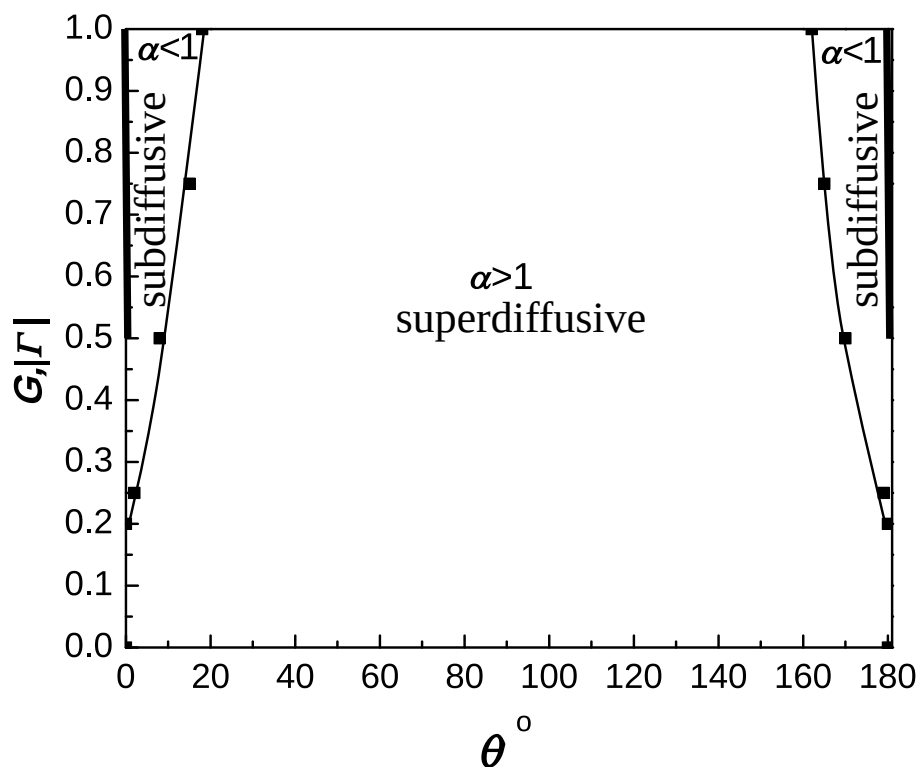


Рисунок 4: “Фазова діаграма” на основі аналізу залежності показника α (4.4) від параметрів $G = |\Gamma|$ і θ . Широкі вертикальні суцільні лінії на $\theta = 0^\circ$ і $\theta = 180^\circ$ відповідають області локалізації ($\alpha = 0$).

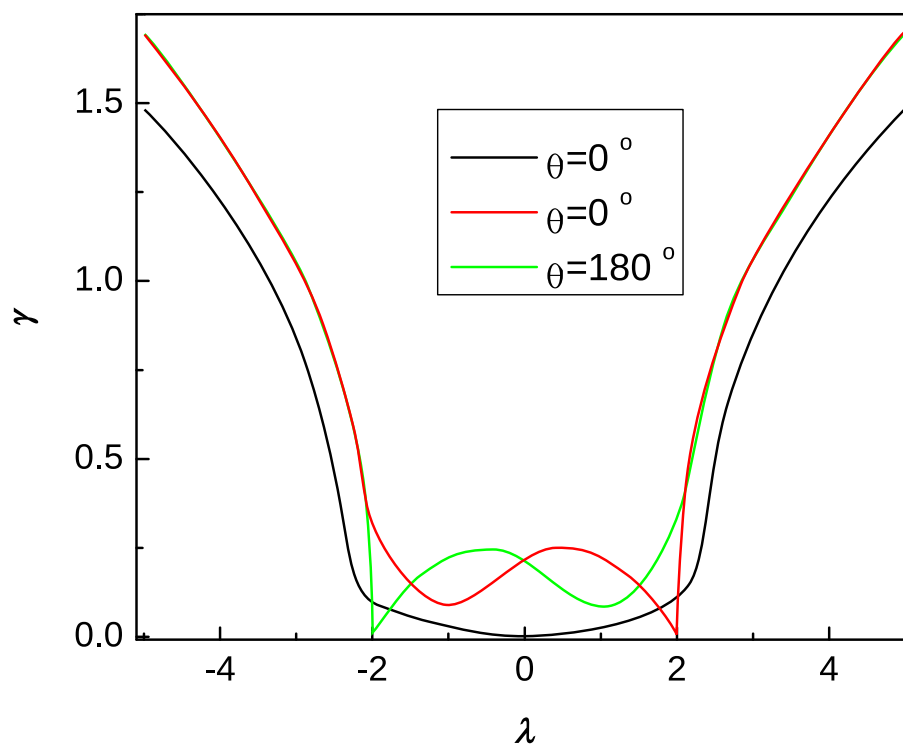


Рисунок 5: Часові залежності показника Ляпунова γ від енергії λ . $|V| = 1$, $G = |\Gamma| = 0,5$ і кількість вузлів решітки хоста $N = 10000$. Чорна лінія відповідає $\theta = 90^\circ$. Червона лінія відповідає $\theta = 0^\circ$, а зелена лінія відповідає $\theta = 180^\circ$.

5 Показник Ляпунова

Для того, щоб краще зрозуміти сенс показника Ляпунова, коротко розглянемо димерну модель з розподілом Бернуллі. Припускається, що $V(x_n)$ може приймати два значення $\pm V_0$ з ймовірностями p і $1 - p$, т.е.

$$P(x = V_0) = p, \quad P(x = -V_0) = 1 - p.$$

$V(x_n) = V_0$ з ймовірністю p і $V(x_n) = -V_0$ з ймовірністю $1 - p$. При цьому на $V(x_n)$ накладаються жорсткі кореляційні умови

$$V(x_{2n}) = V(x_{2n+1}). \quad (5.1)$$

Рівняння Дірака для такої системи має наступний вигляд:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = \mathbf{H} \Phi(x, t) = (c\sigma_x p_x + mc^2 \sigma_z + V(x) \mathbf{I}_2) \Phi(x, t) \quad (5.2)$$

Тут σ_x, σ_z — матриці Паулі, $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $\mathbf{I}_2$ — одинична 2×2 матриця, m — маса, c — швидкість світла, а $\Phi(x, t)$ — спінорна хвильова функція:

$$\Phi(x, t) = \begin{cases} \phi^{(1)}(x, t) \\ \phi^{(2)}(x, t) \end{cases}$$

У дискретному випадку, перейшовши до безрозмірних одиниць ($\hbar = c = 1$), отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{cases} -i [\phi^{(2)}(n, t) - \phi^{(2)}(n-1, t)] + (V(n) + m)\phi^{(1)}(n, t) = i\hbar \frac{\partial \phi^{(1)}(n, t)}{\partial t} \\ -i [\phi^{(1)}(n+1, t) - \phi^{(1)}(n, t)] + (V(n) - m)\phi^{(2)}(n, t) = i\hbar \frac{\partial \phi^{(2)}(n, t)}{\partial t} \end{cases} \quad (5.3)$$

Тут $V(n) = V(x_n)$, $\phi^{(1,2)}(n, t) = \phi^{(1,2)}(x_n, t)$, $n = 0, 1, \dots, N-1$, де N — загальна кількість вузлів решітки.

Окремо розглянемо димерну модель з випадковими масами, а саме одновірний неупорядкований сплав, де маси можуть набувати два значення $\pm V_0$, причому $m_{2n} = m_{2n+1}$. Рівняння (5.2) у такому разі ефективно може бути записане у вигляді:

$$\begin{cases} -i [\phi^{(2)}(n, t) - \phi^{(2)}(n-1, t)] + V(n)\phi^{(1)}(n, t) = i\hbar \frac{\partial \phi^{(1)}(n, t)}{\partial t} \\ -i [\phi^{(1)}(n+1, t) - \phi^{(1)}(n, t)] - V(n)\phi^{(2)}(n, t) = i\hbar \frac{\partial \phi^{(2)}(n, t)}{\partial t} \end{cases} \quad (5.4)$$

Вираз для α -го моменту має вигляд:

$$\langle x_{\pm}^{\alpha}(t) \rangle \equiv x_{\pm}(\alpha, t) = \sum_{n=0}^{N-1} n^{\alpha} |\Phi_{\pm}(n, t)|^2 = \sum_{n=0}^{N-1} n^{\alpha} (|\phi_{\pm}^{(1)}(n, t)|^2 + |\phi_{\pm}^{(2)}(n, t)|^2).$$

Тут індекс "+" означає вирішення завдання Коші для (5.3), (5.4) з початковими умовами $\phi^{(1)}(n, 0) = \delta(n, n_0)$, $\phi^{(2)}(n, 0) = 0$, тобто. частка зі спином "вгору" у початковий момент часу $t = 0$ локалізована на вузлі n_0 , а "-" відповідає випадку, коли $\phi^{(1)}(n, 0) = 0$, $\phi^{(2)}(n, 0) = \delta(n, n_0)$, тобто. частка зі спином "вниз" при $t = 0$ локалізована на вузлі n_0 . Тоді:

$$D(t) = \left\langle \sum_{\sigma=\pm} [x_{\sigma}(2, t) - (x_{\sigma}(1, t))^2] \right\rangle_{\{\xi\}}.$$

Тут $\langle \dots \rangle_{\{\xi\}}$ означає усереднення по реалізації $V(x)$.

$D(t)$ також може бути обчислена в рамках стаціонарного рівняння Дірака:

$$(c\sigma_x p_x + mc^2 \sigma_z + V(x)\mathbf{I}_2) \Phi(x, \lambda) = \lambda \Phi(x, \lambda)$$

Тут λ — власні значення, а

$$\Phi(x, \lambda) = \begin{cases} \phi^{(1)}(x, \lambda) \\ \phi^{(2)}(x, \lambda) \end{cases}$$

- власні функції оператора $\mathbf{H}$ (див. (5.2)). У дискретному випадку для моделі з випадковим потенціалом отримуємо:

$$\begin{cases} -i [\phi^{(2)}(n, \lambda) - \phi^{(2)}(n-1, \lambda)] + (V(n) + m - \lambda)\phi^{(1)}(n, \lambda) = 0 \\ -i [\phi^{(1)}(n+1, \lambda) - \phi^{(1)}(n, \lambda)] + (V(n) - m - \lambda)\phi^{(2)}(n, \lambda) = 0, \end{cases} \quad (5.5)$$

а для моделі з випадковими масами:

$$\begin{cases} -i [\phi^{(2)}(n, \lambda) - \phi^{(2)}(n-1, \lambda)] + (V(n) - \lambda)\phi^{(1)}(n, \lambda) = 0 \\ -i [\phi^{(1)}(n+1, \lambda) - \phi^{(1)}(n, \lambda)] + (-V(n) - \lambda)\phi^{(2)}(n, \lambda) = 0. \end{cases} \quad (5.6)$$

Вираз для $x_{\pm}(\alpha, t)$ у цьому випадку має вигляд:

$$x_{\pm}(\alpha, t) = (\Phi_{\pm}^0, e^{-i\mathbf{H}t} x^{\alpha} e^{i\mathbf{H}t} \Phi_{\pm}^0) \quad (5.7)$$

Аналогічно (5.3) і (5.4) тут $\Phi_{\pm}^0$ позначають хвильові функції зі спином “вгору” і “вниз”, локалізовані на вузлі n_0 :

$$\Phi_{+}^0 = \begin{cases} \delta(n, n_0) \\ 0 \end{cases}, \quad \Phi_{-}^0 = \begin{cases} 0 \\ \delta(n, n_0) \end{cases}.$$

Тоді (5.7) може бути записано у вигляді:

$$x_{\pm}(\alpha, t) = \sum_{n=0}^{N-1} n^{\alpha} \left(\sum_{\mu=0}^1 \left| \sum_{\lambda} \Phi^{*}(n_0, \lambda) \beta^{\mu} \Phi_{\pm}(n, \lambda) e^{i\lambda t} \right|^2 \right).$$

Тут $\beta^0 = \mathbf{I}_2$, $\beta^1 = \sigma_x$, а

$$\Phi_{+}(n_0, \lambda) = \begin{cases} \phi^{(1)}(n_0, \lambda) \\ 0 \end{cases}, \quad \Phi_{-}(n_0, \lambda) = \begin{cases} 0 \\ \phi^{(2)}(n_0, \lambda). \end{cases}$$

Зауважимо, що вираз $\Phi^{*}(n_0, \lambda) \beta^{\mu} \Phi_{\pm}(n, \lambda)$ ($\mu = 0, 1$) являє собою дві перші компоненти матриці щільності заряду-струму $\mathbf{j}(\lambda)$. Тому $x_{\pm}(\alpha, t)$ формаль-

но можна записати у вигляді:

$$x_{\pm}(\alpha, t) = \sum_{n=0}^{N-1} n^{\alpha} |\mathbf{j}^{\mu}(n_0, n, t)|^2,$$

де

$$\mathbf{j}^{\mu}(n_0, n, t) = \sum_{\lambda} \mathbf{j}^{\mu}(n_0, n, \lambda) e^{i\lambda t}.$$

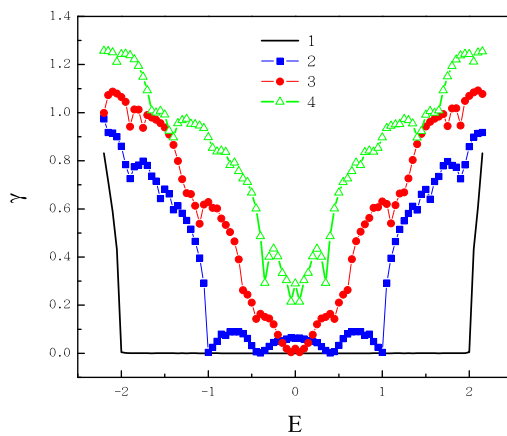
Введемо трансфер-матриці для рівнянь (5.5) та (5.6), відповідно:

$$\mathbf{T}_k(E) = \begin{pmatrix} 1 + m^2 - (E - V(k))^2 & i(E - V(k) + m) \\ i(E - V(k) - m) & 1 \end{pmatrix}$$

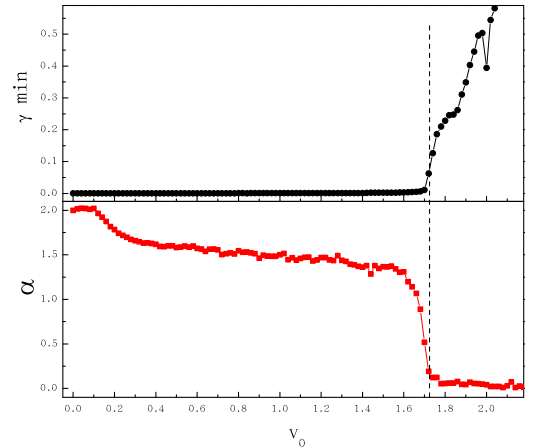
$$\mathbf{T}_k(E) = \begin{pmatrix} 1 + V(k)^2 - E^2 & i(E + V(k)) \\ i(E - V(k)) & 1 \end{pmatrix},$$

де E - енергія. Для даних трансфер-матриць має місце співвідношення:

$$\mathbf{T}_k(E) \begin{pmatrix} \phi^{(1)}(k) \\ \phi^{(2)}(k-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi^{(1)}(k+1) \\ \phi^{(2)}(k) \end{pmatrix}$$



а)



б)

Рисунок 6: а) Залежність показника Ляпунова (4.6) від E при різних значеннях амплітуди потенціалу V_0 . 1 $V_0 = 0$ (упорядкований випадок); 2 $V_0 = 1$; 3 $V_0 = \sqrt{2}$; 4 $V_0 = 1.8$. б) Вгорі: залежність мінімального значення показника Ляпунова від амплітуди потенціалу V_0 . Внизу: залежність показника α (4.4) від V_0 . Всі результати стосується моделі з $m = 0$.

Оскільки радіус локалізації $\sim 1/\gamma$, то необхідною умовою справакалізації станів є звернення *gamma* в нуль. Поведінка $\gamma(E)$ при $n \rightarrow \infty$ визначається величиною модуля трейсу трансфер-матриць: $|Tr(\mathbf{T}_k(E))|$. Розрізняють три випадки 1) $|Tr(\mathbf{T}_k(E))| < 2$ (еліптичні матриці) 2) $|Tr(\mathbf{T}_k(E))| = 2$ (параболічні матриці) та 3) $|Tr(\mathbf{T}_k(E))| > 2$ (гіперболічні матриці).

Розглянемо спершу модель з випадковим потенціалом (5.5) і випадок, коли $m = 0$. При $E = V_0$ трансфер-матриці мають вигляд:

$$\mathbf{T}_k(V_0) = \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 - (2V_0)^2 & 2iV_0 \\ 2iV_0 & 1 \end{pmatrix},$$

якщо $V(n) = V_0$ і $\mathbf{T}_k(V_0) = \mathbf{I}_2$, якщо $V(n) = -V_0$ Оскільки матриці комутують, то

$$\gamma(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log ||(\mathbf{T})^{np}|| = p \lim_{n \rightarrow \infty} \log (||(\mathbf{T})^{np}||)^{1/np}$$

Нагадаємо, що p - ймовірність того, що $V(n) = V_0$. Власні значення $\mathbf{T}$ рівні:

$$\lambda_{1,2} = 1 - 2V_0^2 \pm 2V_0\sqrt{V_0^2 - 1}$$

Як видно, $|\lambda_{1,2}| = 1$ при $V_0 \leq 1$. Отже,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (||(\mathbf{T}^+)^{np}||)^{1/np} = 1.$$

аналогічно розглядається випадок, коли $E = -V_0$. В результаті:

$$\gamma(E = \pm V_0) = p \log 1 = 0.$$

Таким чином в інтервалі $0 \leq V_0 \leq 1$ показник Ляпунова перетворюється на нуль при $E = \pm V_0$.

Розглянемо тепер випадок $m > 0$. Введемо позначення: $E - V_0 = d$,

$E + V_0 = e$ та

$$\mathbf{T}(E, d) = \begin{pmatrix} 1 + m^2 - d^2 & i(d + m) \\ i(d - m) & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T}(E, e) = \begin{pmatrix} 1 + m^2 - e^2 & i(e + m) \\ i(e - m) & 1 \end{pmatrix}.$$

З умови $|\text{Tr}(\mathbf{T}(E, d))| < 2$ (аналогічно $\mathbf{T}(E, e)$) випливає, що $\mathbf{T}(E, d)$ і $\mathbf{T}(E, e)$ – еліптичні при $|d|, |e| \in (m, \sqrt{4 + m^2})$ і, отже, у цьому інтервалі $\gamma(E) > 0$. Виняток становить одна точка. Зауважимо, що через (5.1) $V(n)$ вузлах $2n$ і $2n+1$ приймає однакові значення. Отже, (4.6) входять квадрати $\mathbf{T}(E, d)$, $\mathbf{T}(E, e)$.

Тоді

$$|\text{Tr}(\mathbf{T}(E, d)^2)| = |2 + d^4 + 4m^2 + m^4 - 2d^2(2 + m^2)|.$$

Аналогічно,

$$|\text{Tr}(\mathbf{T}(E, e)^2)| = |2 + e^4 + 4m^2 + m^4 - 2e^2(2 + m^2)|.$$

З умов $|\text{Tr}(\mathbf{T}(E, d)^2)| = |\text{Tr}(\mathbf{T}(E, e)^2)| = 2$ (тобто квадрати обох трансфер-матриць параболічні) слід, що $d, e = \pm\sqrt{2 + m^2}$. Це означає, що показник Ляпунова перетворюється на нуль при $E = 0$, якщо $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$. При $m > 0$ і $V_0 > 0$ це єдина точка, в якій $\gamma(E) = 0$.

Для перевірки отриманих результатів залежності $\gamma(E)$ при різних значеннях V_0 були вивчені допомоги чисельного моделювання. Результати представлені на Рис. 6.а, Рис. 7.а та Рис. 8.а.

У верхній частині Рис. 6.б, представлені залежності мінімального значення показника Ляпунова як функція V_0 :

$$\gamma_{min} = \min_E \gamma(E)$$

Ці залежності також були отримані чисельно. Рис. 6.б відповідає випадку,

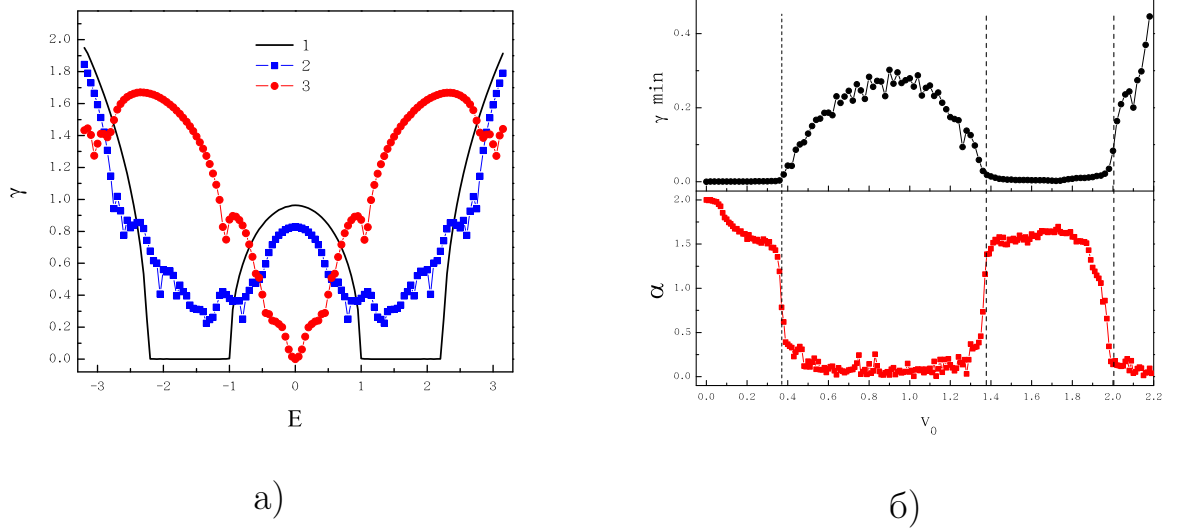


Рисунок 7: а) Залежність показника Ляпунова (4.6) від енергії E за різних значень амплітуди потенціалу V_0 . 1 $V_0 = 0$ (упорядкований випадок); 2 $V_0 = 1/\sqrt{2}$; 3 $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$. б) Вгорі: залежність мінімального значення показника Ляпунова від амплітуди потенціалу V_0 . Внизу: залежність показника α (4.4) від V_0 . Всі результати стосуються моделі з $m = 1$.

коли $m = 0$. Як видно $\gamma_{min} \rightarrow 0$ при $V_0 \lesssim 1.75$.

При $m = 1$ (Мал. 7.б) існують дві області, де $\gamma_{min} \rightarrow 0$: околиці $V_0 = 0$ та околиці $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$. Інших областей, де $\gamma(E) \rightarrow 0$, немає.

Розглянемо тепер модель "випадкових мас". При $E = V_0$ трансфер-матриці мають вигляд:

$$\mathbf{T}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 2iV_0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

якщо $V(k) = V_0$ і

$$\mathbf{T}^- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2iV_0 & 1 \end{pmatrix},$$

якщо $V(k) = -V_0$. $|Tr(\mathbf{T}^+)| = |Tr(\mathbf{T}^-)| = 2$, незалежно від V_0 . Отже, за будь-яких значень амплітуди потенціалу трансфер-матриці є параболічними. Аналогічний результат виходить за $E = -V_0$.

Залежність мінімального значення показника Ляпунова як функція V_0 для моделі випадкових мас представлена на Рис. 8.б. Як видно, γ_{min} осцилює у широкому діапазоні V_0 , залишаючись при цьому $\ll 1$.

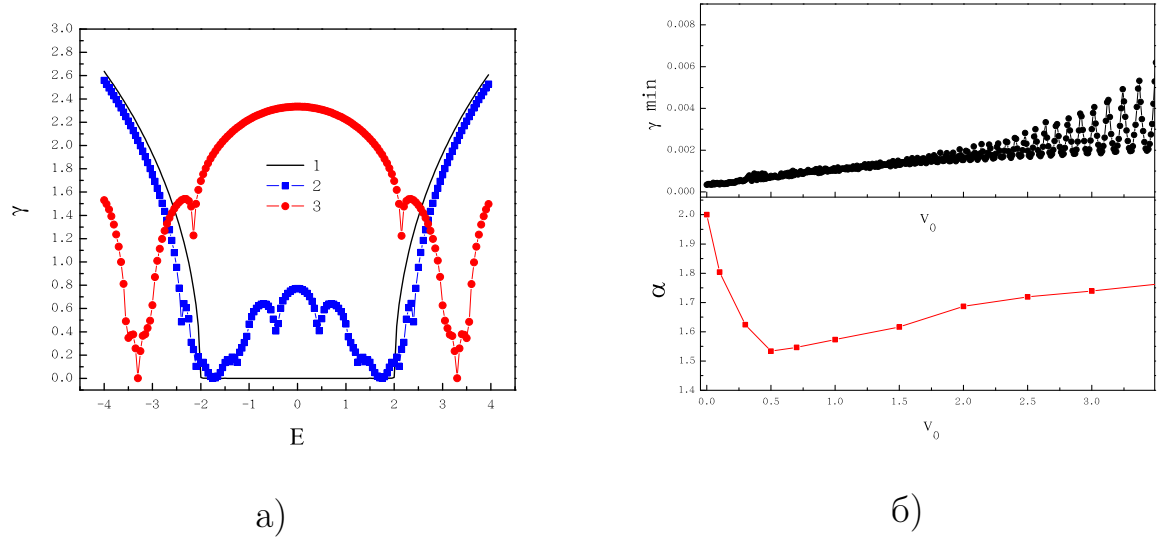


Рисунок 8: а) Залежність показника Ляпунова (4.6) від енергії. 1 $V_0 = 0$ (упорядкований випадок); 2 $V_0 = 1$; 3 $V_0 = 3$. б) Вгорі: залежність мінімального значення показника Ляпунова від амплітуди потенціалу V_0 . Внизу: залежність показника α (4.4) від V_0 . Усі результати відносяться до моделі випадкових мас.

Для того, щоб точки (або інтервали) спектру, де $\gamma(\tilde{E}) = 0$ проявили себе в динаміці системи, що вивчається, необхідно, щоб щільність станів при відповідних значеннях енергії $\tilde{E}$ була відмінна від нуля: $\rho(\tilde{E}) \neq 0$. Нами були отримані чисельні залежності $\rho(E)$ при різних значеннях амплітуди потенціалу V_0 . На Рис. 9.а представлена залежність $\rho(E)$ при $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$. В силу симетрії системи, що вивчається $\rho(E) = \rho(-E)$. Тому для наочності на графіку показана залежність $\rho(E)$ при $E > 0$. Ка видно, $\rho(E) > 0$ при $E = 0$.

Рис. 9.б представлена аналогічна залежність при $V_0 = 1/\sqrt{2}$. Стрілки позначені значення енергій, отримані в роботах [8, 10]. З точністю проведеного чисельного моделювання можна стверджувати, що в цих точках $\rho(\tilde{E}) = 0$. Це ще раз підтверджує, що при $m > 0$ існує єдине відмінне від нуля значення амплітуди потенціалу $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$, при якому можлива делокалізація станів.

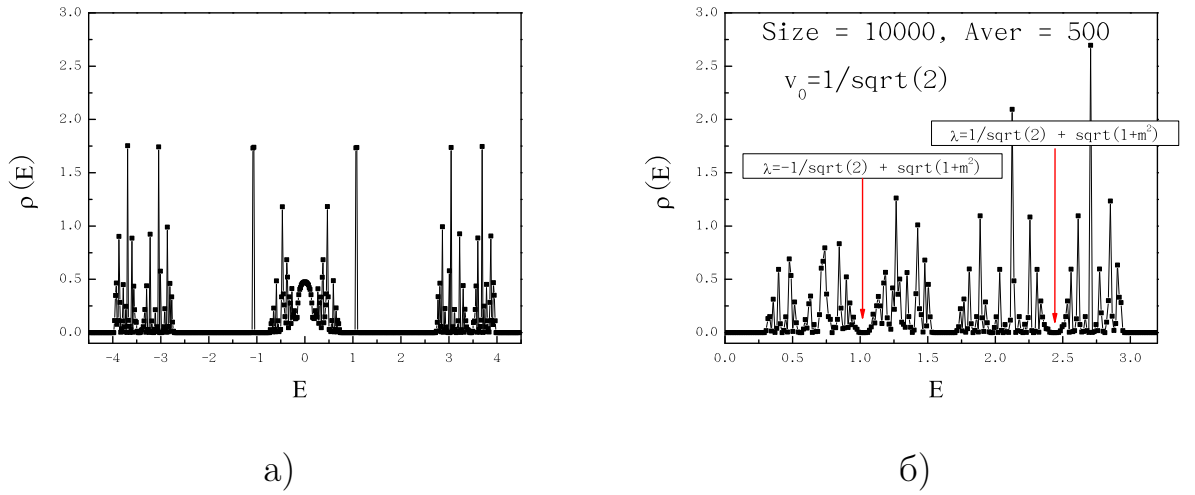


Рисунок 9: Щільність станів за різних значень амплітуди потенціалу V_0 . а) $V_0 = \sqrt{2 + m^2}$. б) $V_0 = 1/\sqrt{2}$. Червоними стрілками позначені точки, де $\gamma(E)$ може звертатися в нуль. В обох випадках маса $m = 1$.

Аналіз залежності дисперсії D від часу t при $t \gg 1$ дозволяє зробити висновок про характер транспорту в системі, що вивчається. Розрізняють п'ять різних режимів:

- $D(t) \rightarrow const$, тобто. $\alpha = 0$. Тут має місце локалізація станів.
- $D(t) \sim t^\alpha$, де $0 < \alpha < 1$ — субдифузійний режим.
- $D(t) \sim t$ — дифузійний режим.
- $D(t) \sim t^\alpha$, де $1 < \alpha < 2$ — супердифузійний режим.
- $D(t) \sim t^2$ — балістичний режим, що відповідає вільному руху.

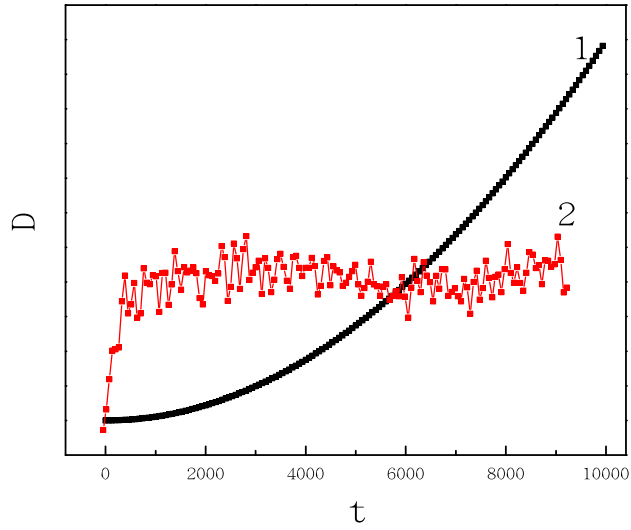


Рисунок 10: Приклади отриманих залежностей $D(t)$. Крива 1 відповідає випадку, коли локалізація станів відсутня, а крива 2— локалізації станів. Для наочності ці криві наведено одному графіку, але у різних масштабах.

Приклади чисельно отриманих залежностей $D(t)$ представлені Рис. 10. Крива 1 відповідає випадку, коли локалізація станів відсутня, а крива 2— локалізації станів. Зауважимо, що з наочності ці криві наведено на одному графіку, але у різних масштабах. Отримані дані апроксимувалися функцією:

$$D(t) = c_0 t^\alpha. \quad (5.8)$$

Залежність показника ступеня α від амплітуди потенціалу V_0 при $m = 0$ наведена внизу Рис. 6.б. Як видно, при $m = 0$ параметр $\alpha \gtrsim 3/2$ в інтервалі $0 \leq V_0 \lesssim 1.7$. Отже, у цьому діапазоні реалізується суперфузійний режим. За $V_0 > 1.7$ відбувається локалізація станів.

Внизу на Рис. 7.б представлена аналогічна залежність при $m = 1$. Існують дві області, де стани справакалізовані $V_0 \lesssim 0.4$ і $1.4 \lesssim V_0 \lesssim 2$. Важливо, що залежності α від V_0 добре корелюють з поведінкою γ_{min} (див. верхні графіки на Рис. 6.б, Рис. 7. б). Області ділалізації станів відповідають інтервалам, де $\gamma_{min} \rightarrow 0$.

Окремий інтерес представляє модель "випадкових мас". Як зазнача-

лося вище, $\alpha \gtrsim 3/2$ у широкому діапазоні V_0 (див. нижню частину Рис. 8.б. Параметр c_0 (5.8) експоненційно швидко зменшується зі зростанням V_0 (див. рис. 11). Фізично c_0 має значення квадрата швидкості. Тому можна сказати, що зі зростанням амплітуди V_0 експоненційно швидко починає зростати ефективна маса, сповільнюючи рух частинок. В результаті часи, на яких може настати локалізація станів, стають більшими.

Вивчено динаміку руху частинок в одномірній моделі Дірака з випадковим димерним потенціалом. Показано, що за певного поєднання параметрів реалізується суперфузійний режим транспорту з досить великим значенням показника ступеня ($\alpha \approx 1.7$). На підставі цього можна зробити висновок про те, що випадковий димерний потенціал слабо впливає на транспортні характеристики системи, що вивчається.

Є підстави вважати, що така незвичайна поведінка транспорту може виявитися і в інших властивостях цієї моделі. Наприклад, у провідних властивостях.

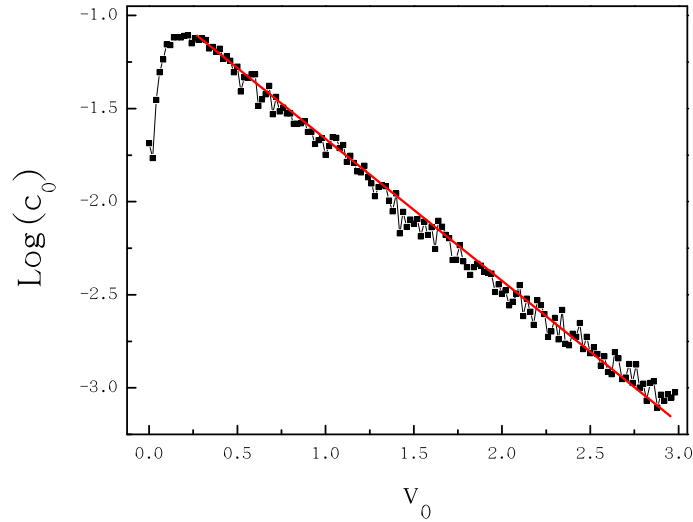


Рисунок 11: Залежність параметра c_0 (див. (5.8)) від V_0 до моделі “випадкових мас”.

6 Висновки

Досліджено транспортні властивості електронів у одновимірному не-впорядкованому ланцюзі в рамках одночастинкового рівняння Шредінгера. У представленій моделі безлад викликаний впливом дефектів, домішок або фононів на позиції іонів, що утворюють ланцюг решітки. Ми показали, що такий безлад впливає як на значення локального потенціалу U , так і на тунельні інтеграли t . Саме завдяки кореляції між випадковими U і t транспорт електронів стає можливим. Досліджено вплив параметрів моделі на цей транспорт. Встановлено області локалізації, супердифузійного та субдифузійного транспорту. Показано, що для певних комбінацій параметрів моделі ($|V| = 1$, $G = |\Gamma| > 0,5$ і для $\theta = 0^0, 180^0$) транспорт електронів неможливий, незважаючи на те, що показник Ляпунова дорівнює нулю в розглянутій області енергії.

Література

- [1] P. W. Anderson. “Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”. В: *Phys. Rev.* 109 (5 бер. 1958), с. 1492—1505. DOI: 10.1103/PhysRev.109.1492. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>.
- [2] T. Holstein. “Studies of polaron motion: Part I. The molecular-crystal model”. В: *Ann. Phys.* 8.3 (листоп. 1959), с. 325—342. ISSN: 0003-4916. DOI: 10.1016/0003-4916(59)90002-8.
- [3] H. Furstenberg та H. Kesten. “Products of Random Matrices”. В: *Ann. Math. Stat.* (1960). URL: <https://www.semanticscholar.org/paper/Products-of-Random-Matrices-Furstenberg-Kesten/f1a2c0a80f901a03>
- [4] P. Gosar та Sang-il Choi. “Linear-Response Theory of the Electron Mobility in Molecular Crystals”. В: *Phys. Rev.* 150.2 (жовт. 1966), с. 529—538. ISSN: 1536-6065. DOI: 10.1103/PhysRev.150.529.

- [5] W. P. Su, J. R. Schrieffer та A. J. Heeger. “Soliton excitations in polyacetylene”. B: *Phys. Rev. B* 22.4 (серп. 1980), с. 2099—2111. ISSN: 2469-9969. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.2099.
- [6] Іл'я́а Mikhaïlovich Lifshítás, Sergiy A. Gredeskul та Leonid A. Pastur. *Introduction to the Theory of Disordered Systems*. Chichester, England, UK: Wiley, бер. 1988. ISBN: 978-0-47187533-8. URL: https://books.google.com.ua/books/about/Introduction_to_the_Theory_of_Disordered.html?hl=ru&id=B6nvAAAAMAAJ&redir_esc=y.
- [7] D. H. Dunlap, Kalyan Kundu та Philip Phillips. “Absence of localization in certain statically disordered lattices in any spatial dimension”. B: *Phys. Rev. B* 40.16 (груд. 1989), с. 10999—11006. ISSN: 2469-9969. DOI: 10.1103/PhysRevB.40.10999.
- [8] Túlio O. Carvalho та César R. de Oliveira. “Critical energies in random palindrome models”. B: *J. Math. Phys.* 44.3 (бер. 2003), с. 945—961. ISSN: 0022-2488. DOI: 10.1063/1.1537462.
- [9] S. Jitomirskaya, H. Schulz-Baldes та G. Stolz. “Delocalization in Random Polymer Models”. B: *Commun. Math. Phys.* 233.1 (лют. 2003), с. 27—48. ISSN: 1432-0916. DOI: 10.1007/s00220-002-0757-5.
- [10] César R. de Oliveira та Roberto A. Prado. “Spectral and localization properties for the one-dimensional Bernoulli discrete Dirac operator”. B: *J. Math. Phys.* 46.7 (лип. 2005). ISSN: 0022-2488. DOI: 10.1063/1.1948328.
- [11] Svetlana Jitomirskaya та Helge Krüger. “Exponential Dynamical Localization for the Almost Mathieu Operator”. B: *Commun. Math. Phys.* 322.3 (бер. 2013), с. 877—882. ISSN: 1432-0916. DOI: 10.1007/s00220-013-1743-9.

- [12] V. Slavin та Y. Savin. “Superdiffusive transport in one-dimensional disordered Dirac model”. В: *Fiz. Nizk. Temp.* 44.12 (груд. 2018), с. 1654—1660. ISSN: 1063-777X. DOI: 10.1063/1.5078617.