A. Zhugayevych[1,2], A. Yurachkivsky[2], P. Argyrakis[3], B. Lev[1]

[1] Institute of Physics, Kyiv, Ukraine
[2] Department of Mathematics, Radiophysics Faculty
[3] Physics Faculty, University of Thessaloniki, Greece

Efficient perturbation expansion for disordered systems and its application to random bond model

Постановка задачі

Для ансамблю випадкових матриць $\{H\}$ знайти усереднену резольвенту (функцію Гріна):

$$\langle G(s) \rangle = \left\langle (s - H)^{-1} \right\rangle$$

- Випадкове блукання на гратці: H – матриця частот переходів, G – лапласів перетвір перехідної імовірності.
- Електрон (фонони, магнони) у розупорядкованому кристалі: H – гамільтоніан в моделі сильного зв'язку, $\rho_x(s) = \mp\frac{1}{\pi} \langle \Im G_{xx}(s \pm i0) \rangle$ – густина станів.

Некорельована діагональна розупорядкованість:

$$H_{xy} = h_{xy} + \varepsilon_x \delta_{xy},$$

де h – фіксована матриця, ε_x – незалежні випадкові величини.

Теорія збурень

- Вибір нульового наближення
- Перегрупування і часткове підсумовування

$$\langle G(s)\rangle = \left\langle (s-H)^{-1}\right\rangle, \quad H_{xy} = h_{xy} + \varepsilon_x \delta_{xy}$$

Вибір нульового наближення

- h – збурення:

$$\langle G_{xy}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{z_1,\ldots,z_n}\left\langle \frac{1}{s-\varepsilon_x} h_{xz_1}\frac{1}{s-\varepsilon_{z_1}} h_{z_1 z_2}\ldots h_{z_n y}\frac{1}{s-\varepsilon_y}\right\rangle$$

- $(\varepsilon-\varepsilon^e)$ – збурення (ε^e – вільний параметр):

$$\langle G_{xy}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{z_1,\ldots,z_n}\langle g_{xz_1}(\varepsilon_{z_1}-\varepsilon^e) g_{z_1 z_2}\ldots(\varepsilon_{z_n}-\varepsilon^e) g_{z_n y}\rangle,$$

де $g \equiv g(s-\varepsilon^e) = (s-\varepsilon^e-h)^{-1}$

$$\langle G_{xy} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{z_1,\dots,z_n} \langle g_{xz_1}(\varepsilon_{z_1} - \varepsilon^e) g_{z_1 z_2} \dots (\varepsilon_{z_n} - \varepsilon^e) g_{z_n y} \rangle$$

Проблеми

- Сингулярні точки g
- Велика амплітуда ε
- Як усереднити для некорельованого ε?

$$\langle G_{xy}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{z_1,\dots,z_n}\langle g_{xz_1}(\varepsilon_{z_1}-\varepsilon^e)g_{z_1z_2}\dots(\varepsilon_{z_n}-\varepsilon^e)g_{z_ny}\rangle$$

Мета

- Зробити оптимальний вибір ε^e.
- Покращити збіжність в сингулярних точках і при великій амплітуді розупорядкованості.
- Використати концентрацію дефектних вузлів як малий параметр і побудувати ряд по концентрації.
- Провести усереднення в явному вигляді для некорельованого ε.

$$\langle G_{xy}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{z_1,\dots,z_n} \langle g_{xz_1}(\varepsilon_{z_1}-\varepsilon^e)g_{z_1z_2}\dots(\varepsilon_{z_n}-\varepsilon^e)g_{z_ny}\rangle$$

Підсумовування головної діагоналі

$$\langle G_{xy}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\substack{z_1,\dots,z_n\\ z_i\neq z_{i+1}}} \langle g_{xz_1}b_{z_1}g_{z_1z_2}\dots b_{z_n}g_{z_ny}\rangle\,,$$

де

$$b_x = \frac{\varepsilon_x-\varepsilon^e}{1-(\varepsilon_x-\varepsilon^e)g_{xx}}$$

так, що

$$(\varepsilon_x-\varepsilon^e)g_{xy} \longrightarrow \frac{(\varepsilon_x-\varepsilon^e)g_{xy}}{1-(\varepsilon_x-\varepsilon^e)g_{xx}}.$$

“Стандартне” наближення ефективного середовища (НЕС): $\langle b_x\rangle = 0$.

- Використати концентрацію дефектних вузлів як малий параметр і побудувати ряд по концентрації.
- Провести усереднення в явному вигляді для некорельованого ε.

Перегрупування

$$\sum_{\substack{z_1,\dots,z_n \\ z_i \neq z_{i+1}}} \longrightarrow \sum_{\substack{z_1,\dots,z_n \\ z_i \neq z_j}}$$

Якщо $\varepsilon_x = \begin{cases} 1 & \text{з імов. } p, \\ 0 & \text{інакше,} \end{cases}$ то $\langle \varepsilon_{x_1} \dots \varepsilon_{x_n} \rangle \sim p^n$ при $x_i \neq x_j$.

Якщо ε_x – незалежні однаково розподілені випадкові величини, то $\langle \varphi(\varepsilon_{x_1}, \dots, \varepsilon_{x_n}) \rangle$ при $x_i \neq x_j$ не залежить від x.

Головний результат

Техніка перегрупування

$$S=\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{z_1,\ldots,z_n} u_{z_1}C_{z_1z_2}\ldots C_{z_{n-1}z_n}v_{z_n}=u^{\top}(1-C)^{-1}v,$$

де C – деяка матриця, u і v – вектори.

$$S=\sum_{m=1}^{\infty}\sum_{\substack{z_1,\ldots,z_m\\ z_i\neq z_j}} u_{z_1}Q_{z_1\ldots z_m}\left(C_{z_2z_1}v_{z_1}+v_{z_2}\right),$$

де $Q_{z_1}=1$, а для $m>1$

$$Q_{z_1\ldots z_m}=\sum_{k=2}^{m}\frac{(-1)^{m-k}}{(m-k)!}\frac{N_k}{D_{1\ldots k}},\quad N_k=\sum_{l=2}^{k}\frac{1}{(k-l)!}C_{1l\ldots 432}D_{l+1\ldots k},$$

тут $C_{i_1\ldots i_n}=C_{z_{i_1}z_{i_2}}\ldots C_{z_{i_{n-1}}z_{i_n}}$ і $D_{i_1\ldots i_n}$ – детермінант матриці $(1-C)$, звуженої на індекси $\{z_{i_1},\ldots,z_{i_n}\}$.

Резольвента

$$\langle G_{xy}\rangle = g_{xy} + \sum_{z} \langle g_{xz} b_z g_{zy}\rangle + \sum_{z\neq u} \left\langle \frac{g_{xz} b_z g_{zu} b_u \left(g_{uz} b_z g_{zy} + g_{uy}\right)}{1 - b_z b_u g_{zu} g_{uz}} \right\rangle + \dots$$

Якщо $\varepsilon_x = \begin{cases} 1 & \text{з імов. } p, \\ 0 & \text{інакше,} \end{cases}$ то

$$\langle G_{xy}\rangle = g_{xy} + p \sum_{z} \frac{g_{xz} g_{zy}}{1 - g_{zz}} + p^2 \sum_{z\neq u} \frac{g_{xz} g_{zu} \left(\frac{g_{uz} g_{zy}}{1 - g_{zz}} + g_{uy}\right)}{(1 - g_{zz})(1 - g_{uu}) - g_{zu} g_{uz}} + O(p^3).$$

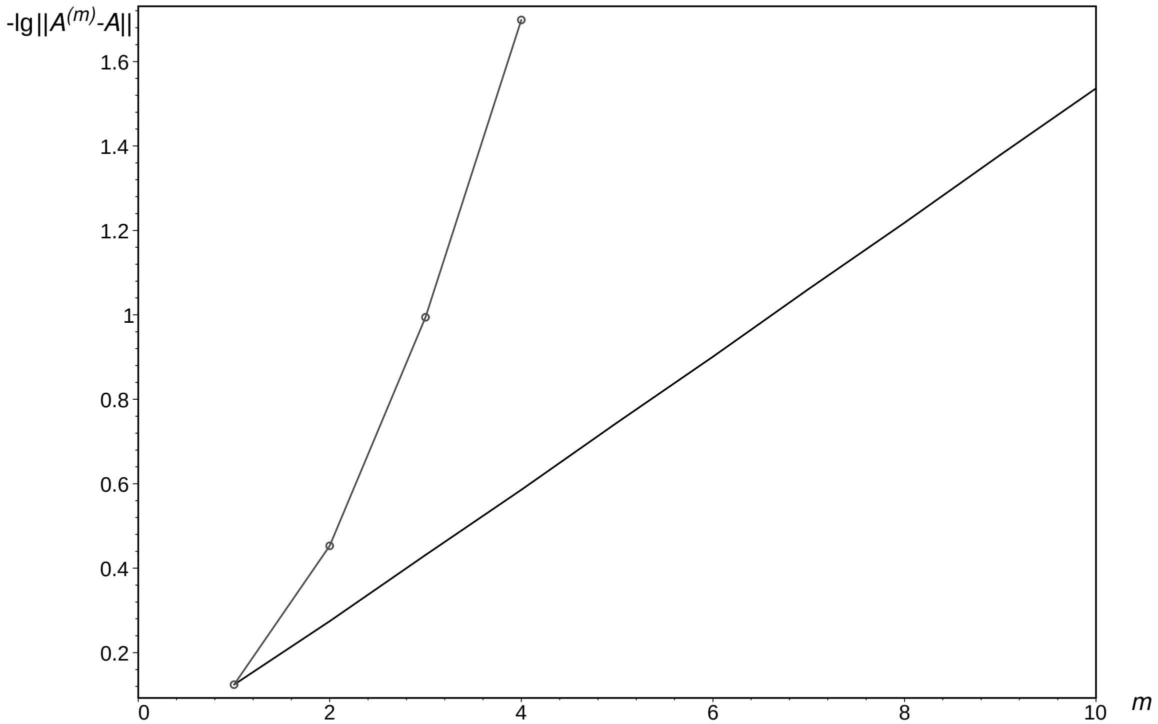


Рис. 1. Точність (за нормою в L_1) m-го порядку розкладу в ряд матриці $A = (1 - C)^{-1}$, де C – випадковий 2D-лапласіан. Нижня крива — стандартний розклад, верхня — з перегрупуванням.

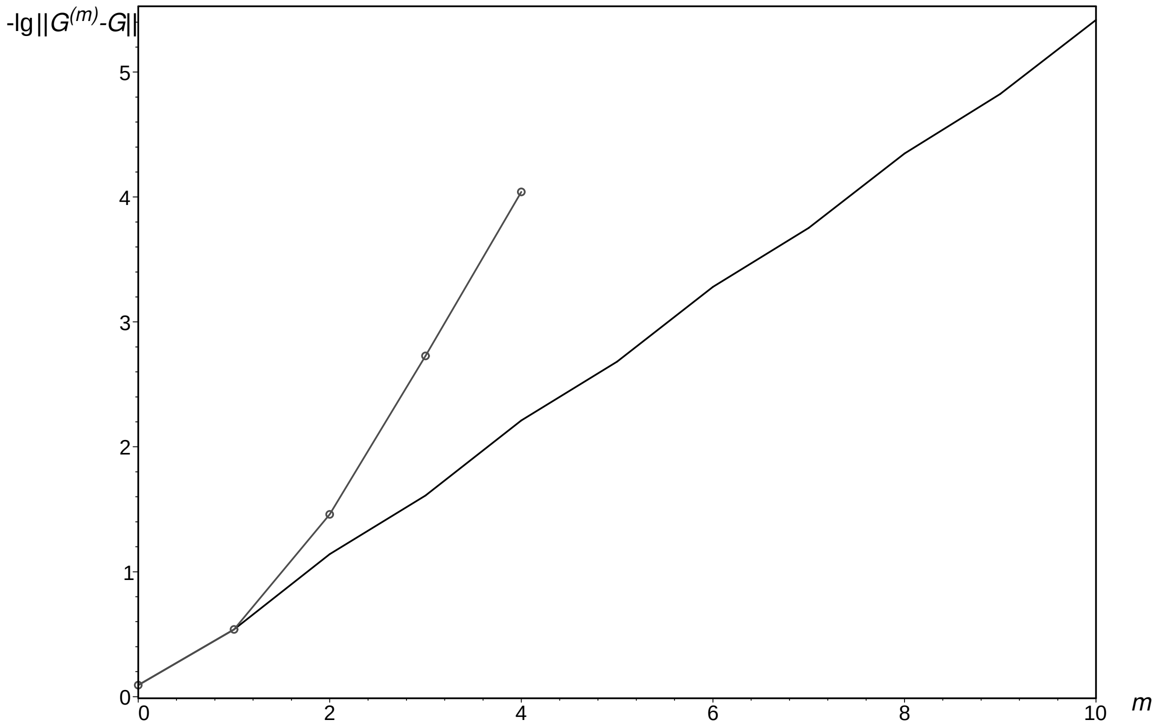


Рис. 2. Точність (за нормою в L_1) m-го порядку теорії збурень резольвенти $G = (s - H)^{-1}$, де H – діагонально збурений 2D-лапласіан з $\Delta\varepsilon = ||h||$ і s на $||h||/4$ більше крайнього правого власного значення. Нижня крива — стандартна теорія збурень, верхня — з перегрупуванням.

Модель випадкових зв'язків (симетричне випадкове блукання)

$$sG_{xy} - \delta_{xy} = \sum_z \Gamma_{xz} \left(G_{zy} - G_{xy} \right),$$

де G_{xy} – лапласів перетвір перехідної імовірності між вузлами x і y, Γ_{xy} – частота переходів між x і y.

Можна переформулювати в термінах зв'язків $\xi = (x, x')$, тоді

$$\langle G_{xy} \rangle = \frac{1}{\Gamma^e} g_{xy} + \\ + \frac{1}{\Gamma^e} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\zeta_1,\ldots,\zeta_n} \left\langle \left(g_{xz_1} - g_{xz_1'} \right) b_{\zeta_1} \tilde{g}_{\zeta_1\zeta_2} b_{\zeta_2} \ldots b_{\zeta_n} \left(g_{z_n' y} - g_{z_n y} \right) \right\rangle,$$

де

$$\tilde{g}_{(x,x')(y,y')} = g_{x'y} + g_{xy'} - g_{xy} - g_{x'y'}, \quad b_\zeta = \frac{\Gamma_\zeta - \Gamma^e}{\Gamma^e - (\Gamma_\zeta - \Gamma^e)\tilde{g}_{\zeta\zeta}},$$

а $g \equiv g(s/\Gamma^e)$ – функція Гріна для одиничних частот переходів (між сполученими вузлами).

Коефіцієнт дифузії

$$\frac{D}{D_0\Gamma^e} = 1 + \left\langle b^i_z \right\rangle + \sum_{m=2}^{\infty} \sum_{\substack{\zeta_2,\ldots,\zeta_m \\ \zeta_i\neq\zeta_j,\zeta_i\neq\zeta_1}} \left\langle Q^{i_1\ldots i_m}_{z_1\ldots z_m} b^{i_2}_{z_2} \left(\partial^{i_2}\partial^{-i_1} g_{z_2-z_1} b^{i_1}_{z_1} + 1\right)\right\rangle,$$

зокрема в другому порядку

$$Q^{i_1 i_2}_{z_1 z_2} = \frac{b^{i_1}_{z_1}\partial^{i_1}\partial^{-i_2} g_{z_1-z_2}}{1 - b^{i_1}_{z_1} b^{i_2}_{z_2}\left(\partial^{i_1}\partial^{-i_2} g_{z_1-z_2}\right)^2}.$$

"Стандартна" умова наближення ефективного середовища: $\left\langle b^i_z \right\rangle = 0$.

Покращена умова: $\frac{D}{D_0\Gamma^e} = 1$.

Модель дефектних зв'язків для квадратної гратки

$\Gamma = 1$ з імовірністю p і $\gamma < 1$ з імовірністю $\bar{p} = 1 - p$ так, що $\bar{p}$ концентрація дефектних зв'язків. Випадок $\gamma = 0$ – модель обірваних зв'язків, $\gamma = 1$ або $p = 1$ – бездефектна гратка.

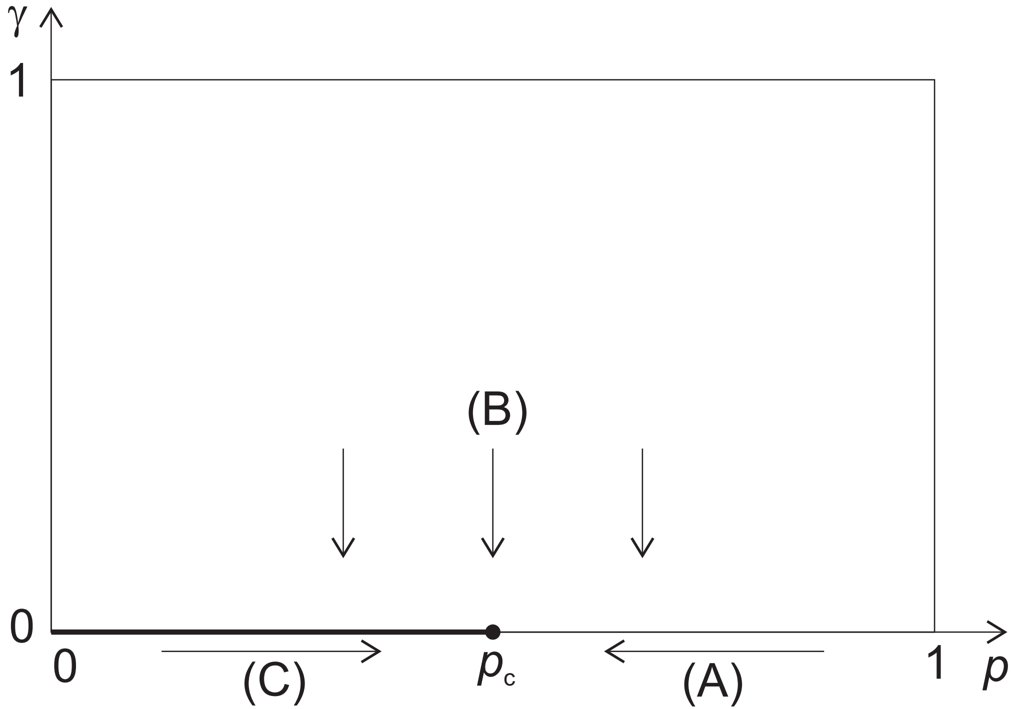


Рис. 3. Фазова діаграма моделі.

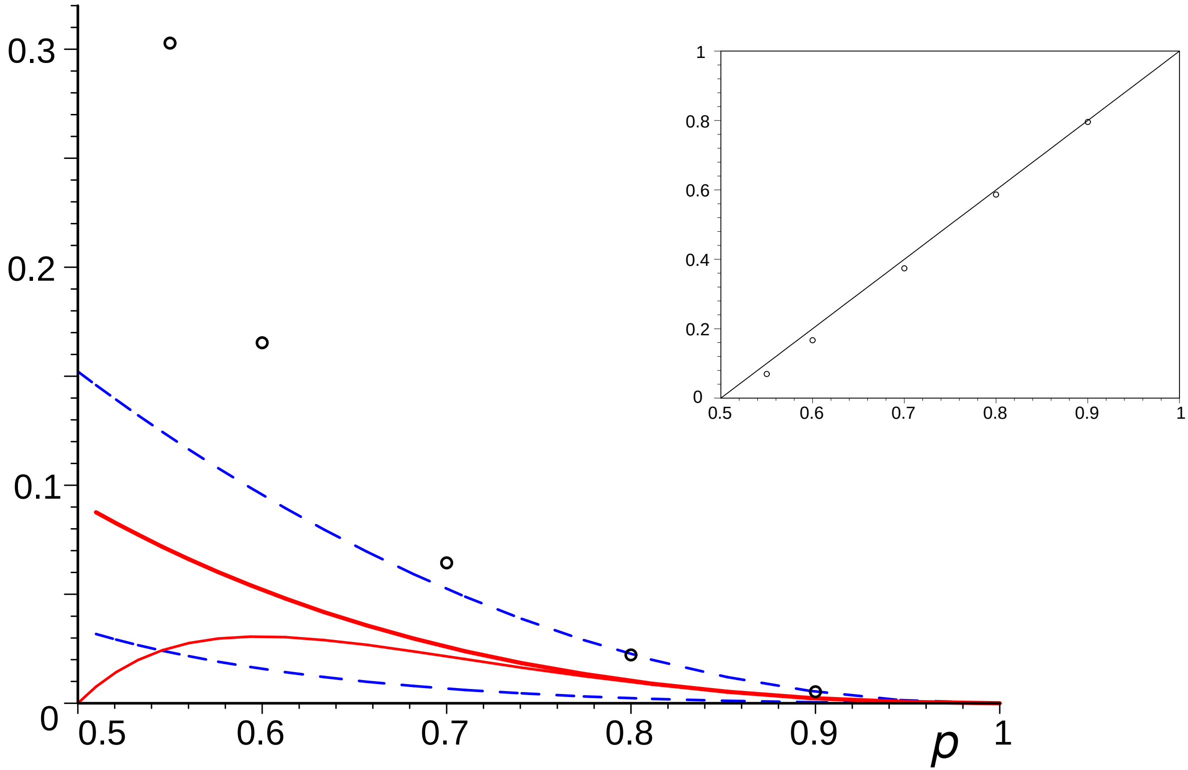
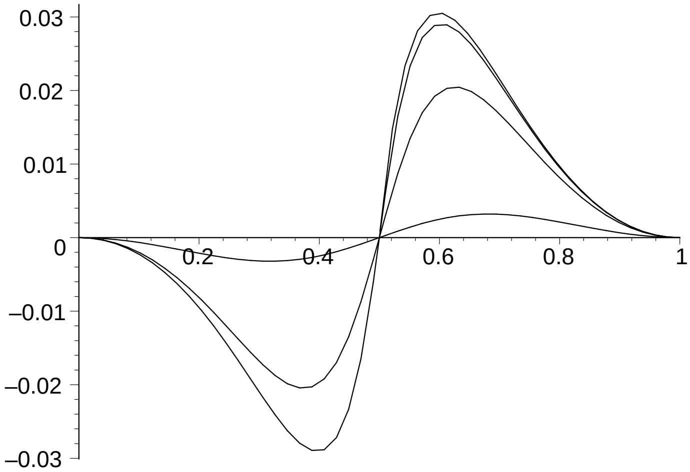


Рис. 4. Область (А). Коефіцієнт дифузії для моделі обірваних зв'язків (вкладений рис.) і його відносна поправка до стандартного НЕС-значення: точки – чисельне моделювання, жирна лінія – покращене НЕС, звичайна лінія – поправка до НЕС, верхня пунктирна – перенормоване НЕС [Sahimi83], нижня пунктирна – двозв'язкове НЕС.



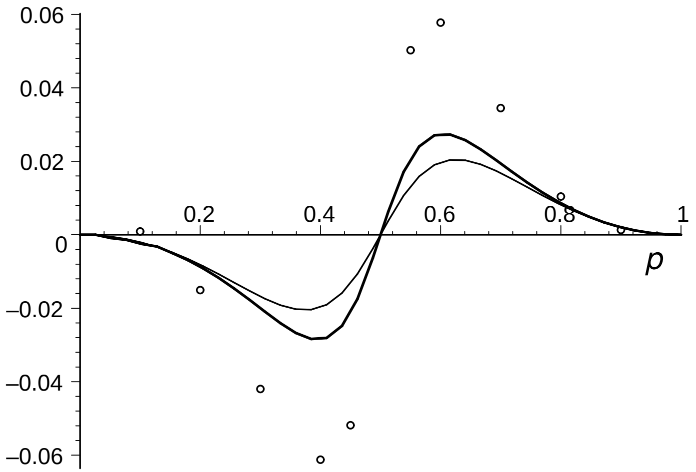


Рис. 5. Область (B). Відносна (до НЕС) поправка до коефіцієнта дифузії: (a) поправка для різних γ, зверху вниз: 0, 0.001, 0.01, 0.1. (b) Поправка до НЕС (звичайна лінія) і покращене НЕС (жирна лінія) у порівнянні з чисельним моделюванням для $\gamma = 0.01$.

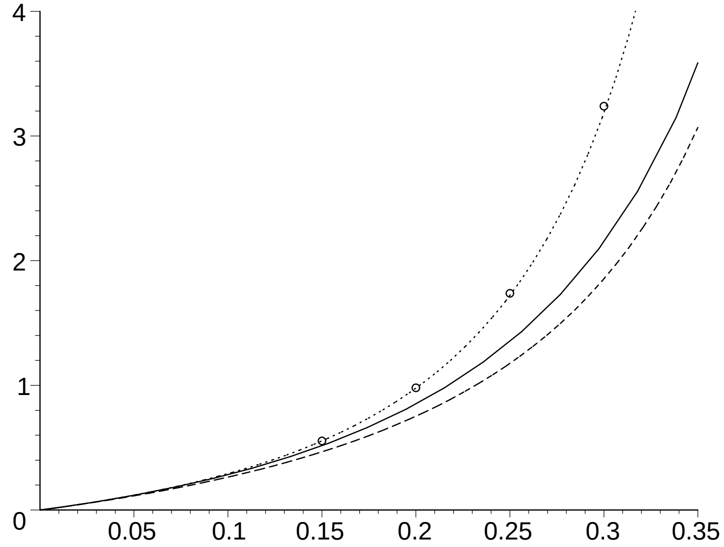


Рис. 6. Область (C). Асимптотика при $t \to \infty$ середньоквадратичного зміщення блукаючої частинки в моделі обірваних зв'язків нижче порогу протікання: штрихова лінія – стандартне НЕС, звичайна лінія – поправка до НЕС, точки – чисельне моделювання, пунктирна лінія – (1,6) Паде-апроксимація розкладу по p.

Висновки

1. Побудовано ефективну теорію збурень для резольвенти (функції Гріна) діагонально розупорядкованої матриці:

- Об'єднано відомі ідеї наближення ефективного середовища і перегрупування ряду теорії збурень.
- Знайдено явні формули для членів перегрупованого ряду.
- Показано, що таке перегрупування дає можливість явно усереднити члени ряду для випадку некорельованого збурення.
- Одержано розклад в ряд по концентрації дефектних вузлів.
- Запропоновано шляхи покращення стандартного варіанту наближення ефективного середовища.

2. Запропонований підхід адаптовано до моделі випадкових зв'язків. Зокрема, обчислено коефіцієнт дифузії в другому порядку теорії збурень, що у порівнянні з іншими підходами дає надійні результати у всьому діапазоні параметрів (де працює НЕС).