

Dynamika wzbudzenia w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem i sprzężeniami dalekiego zasięgu

Karol Kawa

rozprawa doktorska

promotor

prof. dr hab. inż. Paweł Machnikowski



Politechnika
Wrocławska

Wrocław 2022 r.



Politechnika
Wrocławska

Rozprawa Doktorska
Karol Kawa

Katedra Fizyki Teoretycznej
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Politechnika Wrocławska
Wrocław 2017-2022 r.

Spis treści

Streszczenie	3
Abstract	5
Historia i motywacja	7
Wprowadzenie	9
Lokalizacja Andersona	9
Era skalowania	9
Układy fizyczne z nieporządkiem i dalekozasięgowymi sprzężeniami	9
Możliwość delokalizacji w układach niskowymiarowych	10
Cel, treść i struktura pracy	13
Rozdział 1. Lokalizacja Andersona	15
1.1. Metody badania lokalizacji	15
1.2. Teoria skalowania w lokalizacji	18
1.3. Dyskretyzacja hamiltonianu	20
1.4. Rozwiązanie dla układu bez nieporządku	21
1.5. Rozwiązanie numeryczne dla układu jednowymiarowego	23
1.6. Granica ruchliwości	24
Rozdział 2. Model Andersona z całą przeskoku malejącą potęgowo z odległością	27
2.1. Opis modelu	28
2.2. Pasma energetyczne	29
2.3. Efektywny nieporządek	30
2.4. Przejście metal-izolator w układach niskowymiarowych	30
2.5. Pasma energetyczne w szczególnym przypadku $\mu = d$	31
2.6. Równanie ruchu	35
2.7. Szczątkowe obsadzenie centralnego węzła	37
2.8. Metoda Markova-Holtmarka wyznaczania rozkładu prawdopodobieństwa	37
2.9. Szczególny przypadek $\mu = d$	41
2.10. Przybliżone rozwiązanie analityczne wykorzystujące model centralnego atomu ..	42
2.11. Model dwóch atomów	44
2.12. Trójfazowa ewolucja obsadzeń	46
2.13. Granice stosowalności modelu centralnego atomu	48
Rozdział 3. Dyfuzja cząstki w układzie z nieporządkiem i sprzężeniami dalekiego zasięgu	51
3.1. Opis badanego układu i używanego modelu	51

3.2. Wyniki symulacji numerycznych	53
3.3. Przybliżone rozwiązanie analityczne	61
3.4. Analiza średniego przemieszczenia kwadratowego dla wykładnika $\mu > 1$	63
3.5. Dyskusja.....	66
Rozdział 4. Dynamika korelacji w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami	67
4.1. Wprowadzenie	67
4.2. Opis układu	68
4.3. Wyniki symulacji numerycznych	70
4.4. Przybliżone rozwiązanie analityczne	72
4.5. Szybkość propagacji — wyznaczenie stożka świetlnego	73
4.6. Granica słabego nieporządku i braku nieporządku	75
4.7. Równoważne podejście: entropia splątania	76
4.8. Dyskusja.....	77
Rozdział 5. Dyfuzja ekscytynu w dwuwymiarowym zespole kropek kwantowych	83
5.1. Wprowadzenie	83
5.2. Opis układu oraz wykorzystywanego modelu	85
5.3. Metoda skoków kwantowych	88
5.4. Wyniki symulacji numerycznych	89
5.5. Przybliżone rozwiązanie analityczne	94
5.6. Dyskusja	96
Podsumowanie	99
Dodatek.....	101
A. Znajdowanie ewolucji czasowej z diagonalizacji hamiltonianu	101
B. Poziom saturacji dla różnych rozkładów energii	102
Wybrane oznaczenia	105
Spis rysunków	107
Spis tablic.....	109
Dorobek naukowy	111
Lista prac autora.....	111
Prezentacje konferencyjne	111
Wygłoszone seminaria	112
Staże naukowe	113
Stypendia.....	113
Bibliografia	115
Podziękowania	121

Streszczenie

W niniejszej rozprawie badam kwantowy model sieciowy z diagonalnym nieporządkiem oraz sprzężeniami malejącymi potęgowo z odległością, $\propto 1/r^\mu$. W ramach wstępu przedstawiam najważniejsze własności modelu znane z literatury, wśród których wyróżnia się możliwość występowania stanów zdelokalizowanych, nawet w układach niskowymiarowych, co stoi w sprzeczności z rezultatami hipotezy skalowania jednym parametrem. W moich badaniach skupiam się jedynie na przypadku, w którym nieporządek, zadany przez odchylenie standardowe rozkładu diagonalnych energii, jest duży w porównaniu z maksymalnym sprzężeniem pomiędzy węzłami.

Badam ewolucję cząstki umieszczonej początkowo w środku sieci. Znajduję asymptotyczne, szcztątkowe obsadzenie centralnego węzła, które w reżimie silnego nieporządku oraz dla $\mu > d$ jest tylko nieznacznie mniejsze od jedności, natomiast dla $\mu = d$ możliwy jest realny transport, co zostało wykazane przez P.W. Andersona dla układu trójwymiarowego. W tym ostatnim przypadku znajduję średni czas połowicznego zaniku obsadzenia centralnego węzła.

Gdy nieporządek jest duży, istotne są tylko bezpośrednie przeskoki z centralnego węzła na inne węzły. Zaniedbując przejścia wyższych rzędów, możliwe jest analityczne rozwiązanie równania Schrödingera na amplitudy prawdopodobieństwa obsadzenia węzła przez cząstkę w konkretnej chwili czasu. Dynamika obsadzeń na dowolnym węźle przebiega jakościowo w taki sam sposób, tj. w trzech następujących po sobie fazach. Najpierw obsadzenie rośnie z kwadratem czasu, co jest fundamentalną własnością układów kwantowych ze sprzężeniami dalekiego zasięgu, którą wyprowadza się również z rachunku zaburzeń. Następnie w odpowiedniej chwili czasu, tym wcześniejszej im silniejszy jest nieporządek, następuje zmiana trendu wzrostu na liniowy w czasie. Ostatecznie, poziom obsadzenia się wysycza.

Trójfazowa dynamika wzbudzenia znajduje odzwierciedlenie w zachowaniu się średniego przemieszczenia kwadratowego. Dyfuzja cząstki kwantowej odbywa się zatem również w trzech fazach, które w terminach teorii transportu określa się jako dyfuzję balistyczną (pierwsza faza ruchu), dyfuzję standardową (druga faza ruchu), saturację (końcowa faza ruchu). Przy pomocy symulacji numerycznych, obliczam średnie przemieszczenie kwadratowe dla modelu ze sprzężeniem odwrotnie proporcjonalnym do odległości pomiędzy węzłami ($\mu = 1$). Znajduję wartości parametrów dynamicznych, prędkość balistyczną pierwszej fazy ruchu, współczynnik dyfuzji drugiej fazy ruchu oraz poziom saturacji jako funkcje siły nieporządku oraz rozmiaru układu. Rozwiązanie analityczne dostępne w modelu centralnego atomu pozwala na znalezienie dokładnych formuł określających zależność parametrów dynamicznych od siły nieporządku oraz od wielkości układu dla dowolnego μ .

Asymptotyczne obsadzenie węzłów rozkłada się potęgowo wzdłuż liniowego wymiaru układu, co oznacza gruboogonowy rozkład obsadzeń. Można zatem mówić o potęgowej lokalizacji cząstki na sieci.

Następnie badam dynamikę korelacji rozchodzących się w układzie określonych przez dwupunktową funkcję korelacji. Podczas dyfuzji (kwazi)cząstki przez układ, gdy cząstka dociera do określonego węzła, pomiędzy nim a węzłem centralnym narasta korelacja. Funkcja korelacji w obrazie jednocząstkowym okazuje się być proporcjonalna do obsadzenia węzła, z czego wynika jej potrójna dynamika wzrostu na węźle. Analityczne wyprowadzenia pozwalają na ilościowe i jakościowe określenie dynamiki korelacji. Na koniec znajduję również czas potrzebny do osiągnięcia zadanej wartości korelacji w funkcji numeru węzła, który jest miarą szybkości propagacji korelacji. Ze względu na trójfazową ewolucję funkcji korelacji, propagacja zmienia swoją zależność czasową. W szczególnym przypadku $\mu = 1$ propagacja rozpoczyna się jako ruch balistyczny, a następnie, od chwili czasu wyznaczającej przejście między fazami, zmienia się w standardową dyfuzję. Gdy $\mu > 1$, propagacja w pierwszej części jest zawsze sub-balistyczna, natomiast w drugiej sub-dyfuzyjna.

Na koniec badam teoretycznie dyfuzję ekscytynu w realistycznym układzie samorosnących kropek kwantowych na dwuwymiarowej kołowej mesie. Z początkowo wzbudzonej optycznie kropki zachodzi transport na pozostałe sztuczne atomy. Kwantowa dyfuzja odbywa się poprzez sprzężenia dalekiego zasięgu będące potęgowymi funkcjami odległości, podobnie jak w badanym przeze mnie wcześniej modelu. Odległości pomiędzy kropkami są na tyle duże, że ich funkcje falowe się nie przekrywają. Dodatkowo rozmiar układu może znacząco przekraczać długość emitowanej fali elektromagnetycznej tak, że przybliżenie dipolowe nie jest słuszne. Zakładam przy tym skończony czas życia ekscytynu. Ponownie, dyfuzja przebiega w trzech następujących po sobie fazach: transport balistyczny, dyfuzja standardowa oraz wysycenie. Korzystając z wyników otrzymanych wcześniej, znajduję parametry dynamiczne ewolucji. Badam również jaki wpływ na dynamikę ma skończony czas życia ekscytynu.

Abstract

In this thesis, I study a lattice model with diagonal energy disorder and couplings diminishing with distance as a power-law, $\propto 1/r^\mu$. As an introduction, I present the most important properties of the model known from the literature, such as the possibility of the presence of delocalized states even in low-dimensional systems, which is at odds with well-known results employing the single parameter scaling hypothesis. I focus only on the case where the disorder given by the standard deviation of the distribution of diagonal energies is large in comparison with maximal coupling in the system.

I study the evolution of a (quasi)particle initially placed at the center of the lattice. I find an asymptotic survival occupation of the central node that is only slightly smaller than unity in the regime of large disorder for $\mu > d$, while for $\mu = d$ real transport may occur (as it was shown by P.W. Anderson for 3-dimensional system) and I determine the decay time. When the disorder is strong, only jumps from the central node to remote ones are significant. Neglecting higher order jumps in the model, it is possible to analytically solve the Schrödinger equation for the amplitudes of the probability of finding a particle on a site at a particular instant of time. The dynamics of the occupation at any node proceeds qualitatively the same way, i.e., in three consecutive phases. First, the occupation increases with the square of time, which constitutes a fundamental property of quantum systems with long-range interactions arising from the perturbation theory. Then, at a certain moment in time, the growth trend changes to linear in time. Finally, the occupation level saturates.

The triple-phase excitation dynamics is reflected in the behavior of the mean square displacement. The interpretation in transport theory terms is as follows, the first phase of the motion represents ballistic diffusion, the second — standard diffusion followed by saturation. Using numerical simulations, I calculate the mean square displacement, only for the model with coupling inversely proportional to the distance between nodes ($\mu = 1$). I find the values of the dynamic parameters, the ballistic velocity of the first phase of motion, the diffusion coefficient for the second phase of motion, and the saturation level as a function of the disorder strength and the size of the system. The analytical solution available within the central atom model allows me to find exact formulas for the dependence of the dynamical parameters on the disorder force and on the system size for any value of μ .

The asymptotic occupation of the sites has heavy-tailed power-law distribution along the linear dimension of the system. One can therefore speak of a power-law localization of the particle in the system.

Secondly, I study the dynamics of the correlations propagating in the system defined by the two-point correlation function. During the diffusion of a (quasi)particle through the system, when the particle arrives at a particular node, a correlation is formed between it and the central

node. In the single particle picture, the correlation function is proportional to the occupation of the node, which implies the triple-phase growth of the correlation at each node. Analytical derivations allow me to quantify and qualify the correlation dynamics. I also find the time needed to reach a given correlation value as a measure of the propagation speed. Because of the triple phase evolution of the correlation function, the propagation changes its time dependence. In the particular case of $\mu = 1$, the propagation starts as a ballistic motion, then, at a certain crossover time, turns into standard diffusion. When $\mu > 1$, the propagation in the first part is always sub-ballistic, while in the second part it is sub-diffusive.

Finally, I study theoretically the exciton diffusion in a realistic system of self-assembled quantum dots on a two-dimensional circular mesa. From the initially optically excited dot, transport to the remaining artificial atoms occurs. Quantum diffusion occurs via long-range couplings that are power-law functions of the distance, similarly to the model I studied earlier. The distances between the dots are large enough that their wave functions do not cross. Additionally, the size of the system may significantly exceed the emitted electromagnetic wavelength such that the dipole approximation is not valid. In doing so, I assume a finite lifetime for the exciton. Again, diffusion proceeds in three successive phases: ballistic transport, standard diffusion, and saturation. Using the results obtained earlier, I find the dynamic parameters of the evolution. I also investigate what effect the finite lifetime of the exciton has on the dynamics.

Historia i motywacja

Historia obecnej rozprawy doktorskiej sięga czasu moich studiów magisterskich (2015-2017) na Politechnice Wrocławskiej. Wtedy to rozpocząłem badanie dyfuzji ekscytonu w dwuwymiarowym zespole kropek kwantowych pod okiem mojego ówczesnego i obecnego Promotora, prof. Pawła Machnikowskiego.

Badania dotyczyły bardzo konkretnego układu fizycznego, z którym pracują fizycy eksperymentalni. Początkowo wzbudzona kropka kwantowa przekazuje ekscyton pozostałym kropkom, pomimo tego, że kropki znajdują się na tyle daleko od siebie, że ich funkcje falowe się nie pokrywają. Takie kropki emitują koherentnie falę elektromagnetyczną, skąd efekt ten nazywany jest superradiancją (ang. *superradiance*). Za dyfuzję ekscytonu odpowiada sprzężenie pomiędzy kropkami, siły dyspersyjne, przenoszone przez rezerwuuar elektromagnetyczny [1–3]. Sprzężenie to jest funkcją odległości i dla układów o małej gęstości powierzchniowej kropek maleje odwrotnie proporcjonalnie do odległości między kropkami, $\propto 1/r$. Na szczególną uwagę zasługiwała potrójna dynamika ekscytonu, który początkowo dyfundował balistycznie, następnie w określonej chwili czasu, dynamika zmieniała się na dyfuzję standardową, by po pewnym czasie zatrzymać się na osiągniętym poziomie. Początkowo badałem układ kropek, zadając realistyczne parametry materiałowe. Zagadnienie nosiło jednak znamiona bardziej fundamentalnej fizyki, gdyż można było je sprowadzić do modelu wprowadzonego początkowo przez Andersona w 1958 r. [4] w celu badania dyfuzji pojedynczej cząstki w ciele stałym. Porzuciłem zatem kropki kwantowe, by zająć się zagadnieniem lokalizacji Andersona.

Wykonując symulacje numeryczne, zadawaliśmy sobie pytanie, czy możliwe jest znalezienie rozwiązania analitycznego dla rozważanego modelu. Okazało się to możliwe. Znalezione przez nas wzory analityczne dokładnie odtwarzają wyniki symulacji, jednak jedynie w reżimie silnego nieporządku. Rozwiązanie analityczne było możliwe, gdyż, w silnie niejednorodnym układzie, znaczenie mają jedynie bezpośrednie przeskoki do odległych „atomów”. Zaniedbanie przeskoków wyższych rzędów nazwaliśmy „modelem centralnego atomu”. Większa część mojej rozprawy opiera się na tym rozwiązaniu analitycznym.

Początkowo, nasze badania dotyczyły jedynie modelu, w którym sprzężenia maleją odwrotnie proporcjonalnie do odległości między atomami, $\propto 1/r$. Dla takiego układu badaliśmy dynamikę średniego przemieszczenia kwadratowego. W 2020 r. opublikowaliśmy nasze wyniki w *Physical Review B* [5]. Artykuł, który, prawdę mówiąc, dojrzewał do napisania około trzech lat, został przyjęty przez czasopismo w trzy tygodnie, praktycznie bez konieczności nanoszenia poprawek.

W późniejszych badaniach następowała dalsza generalizacja, tzn. przeszliśmy do zbadania modelu, w którym sprzężenie pomiędzy atomami maleje z pewną potęgą odległości $\propto 1/r^\mu$. Analityczne rozważania prowadzone dla przypadku $\mu = 1$ dały się w bezpośredni sposób rozszerzyć dla $\mu > 1$. Model wprowadzony oryginalnie w połowie XX wieku przez Andersona [4] odzyskał

swoją popularność i był szeroko badany w ostatnich latach (zob. Wprowadzenie). Zainteresowałem się zatem tym modelem samym w sobie, zgłębiając jego właściwości, z których chyba najbardziej fascynującą jest możliwość występowania stanów zdelokalizowanych w układach niskowymiarowych ($d < 3$) [6].

Kolejnym zagadnieniem, do którego chcieliśmy zaprząć nasze wyprowadzenia, było zbadanie dynamiki korelacji rozchodzącej się w układzie jednowymiarowym. W obrazie jednocząstkowym dwupunktowa funkcja korelacji wyraża się przez obsadzenie węzłów. Byliśmy w stanie odwzorować wyniki symulacji wzorami analitycznymi i zastanowić się nad fizyką zawartą w tych wzorach.

Na koniec należało powrócić do tematu, od którego wszystko się zaczęło, tj. do zbadania dynamiki dyfuzji ekscytynu w realistycznym układzie samorosnących kropek kwantowych rozmieszczonych losowo na kołowej mesie. Zasadnicza różnica pomiędzy prostym modelem sieciowym a realistycznym układem sztucznych atomów leżała nie tylko w zadaniu parametrów materiałowych, ale również w zmienionej postaci sprzężenia pomiędzy kropkami o oscylującym charakterze $\propto \cos(k_0 r)/(k_0 r) + \sin(k_0 r)/(k_0 r)^2 + \cos(k_0 r)/(k_0 r)^3$ (gdzie k_0 jest liczbą falową emitowanego promieniowania), losowym ułożeniu kropek oraz skończonym czasie życia ekscytynu prowadzącym do dyssypacji. Pomimo tego, średnie przemieszczenie kwadratowe dla ekscytynu odtwarza jakościowo wszystkie właściwości prostego modelu i możliwe jest znalezienie przybliżonego rozwiązania analitycznego, stosując szereg uproszczeń słusznych dla zadanych wartości parametrów układu.

W ten sposób zebrałem materiał do niniejszej rozprawy, który można by podzielić na cztery części. Pierwsza dotyczy *per se* właściwości modelu z diagonalnym nieporządkiem oraz potęgowymi sprzężeniami, druga, dynamiki średniego przemieszczenia kwadratowego określającego dyfuzję, trzecia, dynamiki korelacji, czwarta, dyfuzji ekscytynu w zespole kropek kwantowych.

Wprowadzenie

Lokalizacja Andersona

Brzemienny w skutki artykuł P. W. Andersona¹ [4] przewidywał brak dyfuzji w pewnych nieuporządkowanych układach sieciowych w trzech wymiarach (3D). Anderson zaproponował prosty model fizyczny, w którym cząstka znajdująca się na regularnej, trójwymiarowej sieci doświadcza potencjału o losowej wartości na węźle oraz może skakać pomiędzy węzłami dzięki dalekozasięgowym sprzężeniom malejącym z pewną potęgą odległości. Dla odpowiednio dużego nieporządku oraz odpowiednio szybko malejących sprzężeń cząstka nie była w stanie transportować się w układzie. Lokalizacja Andersona występuje zatem ze względu na panujący w układzie nieporządek. Wspomniany artykuł rozpoczął tym samym nową dziedzinę badań w fizyce fazy skondensowanej.

Era skalowania

Chociaż oryginalnie dyskusja toczyła się wokół układów ze sprzężeniami będącymi malejącą funkcją potęgową odległości, późniejsze badania zajmowały się układami ze sprzężeniami tylko z najbliższymi sąsiadami. Dla takich układów, Mott oraz Twose [7] udowodnili brak dyfuzji w jednym wymiarze (1D). Następnie, tzw. „gang czterech”, tj. Abrahams, Anderson, Licciardello oraz Ramakrishnan zaproponowali w [8] hipotezę skalowania przewodności jednym parametrem i wykazali nieobecność dyfuzji w dwóch wymiarach (2D), potwierdzając przy tym lokalizację w układach jednowymiarowych oraz przejście fazowe w układzie trójwymiarowym.

Układy fizyczne z nieporządkiem i dalekozasięgowymi sprzężeniami

Po czasie, poza modelami ciasnego wiązania z losowym potencjałem i sprzężeniem tylko z najbliższymi sąsiadami, różne inne modele teoretyczne były badane pod kątem obecności lokalizacji i przejścia metal-izolator [6, 9]. Do łask powrócił hamiltonian z oryginalnej pracy Andersona tj. model z nieskorelowanym losowym potencjałem oraz dalekozasięgowym sprzężeniem o charakterze funkcji potęgowej $\propto 1/r^\mu$, tyle że również w układach niskowymiarowych (1D, 2D) [6, 10]. Odpowiada on różnym eksperymentalnym oraz naturalnym układom fizycznym. Na przykład, Levitov [11] analizował delokalizację modów akustycznych rozchodzących się w trójwymiarowym kryształ i sprzężonych oddziaływaniem dipolowym $\propto 1/r^3$. Ponadto podobne układy fizyczne były badane pod kątem transferu energii. Wstępnym etapem do fotosyntezy, wykorzystywanej przez niektóre organizmy żywe, jest transport energii od miejsca

¹Philip Warren Anderson [ur. 13 grudnia 1923 w Indianapolis (USA) – zm. 29 marca 2020 r. w Princeton (USA)] – laureat Nagrody Nobla w 1977 r. razem z Nevillem F. Mottem oraz Johnem van Vleckiem „za fundamentalne badania teoretyczne struktury elektronowej układów magnetycznych i układów nieuporządkowanych”.

wzbudzenia do centrum reakcji, w którym pośredniczy oddziaływanie dipolowe $\propto 1/r^3$ pomiędzy kolejnymi „antenami” [12–14]. Również układy wielociałowe z oddziaływaniem dipolowym były badane pod kątem lokalizacji [15]. Rozważano też model, w którym występują zarówno krótko- jak i dalekozasięgowe dipolowe przeskoki, by określić transfer energii w samorosnących nanopierścieniach [16]. Wykazano, że dipolowe sprzężenia stabilizują układ przeciw nieporządkowi. Dalej, w dwuwymiarowych zespołach kropek kwantowych obserwuje się transport wzbudzenia pomiędzy kropkami [17]. Transport ten jest bardziej wydajny w strukturach o małym zagęszczeniu kropek, co wyklucza nakładania się na siebie funkcji falowych sąsiednich kropek, a więc i mechanizm kwantowego tunelowania. Obiecującym kandydatem na właściwy mechanizm transferu energii w tym przypadku jest sprzężenie dalekozasięgowe pomiędzy kropkami. Wykazano w [18–20], że efekty widoczne w luminescencji zespołu kropek nie dają się wyjaśnić przez własności pojedynczego emitera. Fundamentalne sprzężenie pomiędzy kropkami wynika z ich oddziaływania ze wspólnym rezerwuarem elektromagnetycznym, sprzęgając ze sobą kropki poprzez siłę dyspersyjną $\propto \cos(k_0 r)/(k_0 r) + \sin(k_0 r)/(k_0 r)^2 + \cos(k_0 r)/(k_0 r)^3$ [1–3], gdzie k_0 jest wartością wektora falowego odpowiadającego rezonansowej długości fali.

Możliwość delokalizacji w układach niskowymiarowych

Hipoteza skalowania jednym parametrem daje jedynie przybliżony wynik. Zakłada oddziaływanie skończonego zasięgu, nieskorelowany nieporządek i symetrię odwrócenia w czasie. Pozostawia przestrzeń na możliwość dyfuzji w pewnych modelach, nawet w układach niskowymiarowych.

Posługując się metodą grupy renormalizacji Rodríguez *et al.* [6] udowodnili istnienie stanów zdelokalizowanych w modelu z nieskorelowanym diagonalnym nieporządkiem oraz potęgowymi sprzężeniami malejącymi z odległością jak $1/r^\mu$ dla wykładnika μ większego niż wymiar przestrzenny układu, ale mniejszego niż $3d/2$, tj. $d < \mu < 3d/2$. Delokalizacja może występować na jednej z krawędzi pasma energetycznego, nawet w układach jedno- i dwuwymiarowych.

Taki sam model został wykorzystany do badania propagacji jednowymiarowego pakietu falowego [17]. Ewolucję pakietu falowego opisuje tzw. średnie przemieszczenie kwadratowe² oraz odwrotny stosunek uczestnictwa³. Podobnie dla $\mu > 3/2$ pakiet falowy lokalizuje się, tj. nie może opuścić pewnego skończonego obszaru. Jest to zrozumiałe, gdyż dla rosnącego μ zmniejsza się zasięg przeskoków.

Szczególny przypadek stanowi układ, w którym $\mu = 1$. Badany bez obecności nieporządku [21] wykazał kombinację dwóch rodzajów transportu: standardowej dyfuzji oraz superdyfuzji. Nie został jednak wyczerpująco zbadany dla układu z nieporządkiem. Było to spowodowane jego krytycznymi własnościami, takimi jak rozbieżna do nieskończoności energia na jednej z krawędzi pasma, co implikuje nieskończoną energię potrzebną do lokalizacji tychże stanów [22].

W niniejszej rozprawie badam model, w którym pojedyncza cząstka poruszająca się na regularnej d -wymiarowej sieci doświadcza na węźle losowego potencjału o dużym odchyleniu standardowym, natomiast przeskoki umożliwia dalekozasięgowe sprzężenie pomiędzy węzłami

²Zob. definicję (3.2).

³Zob. definicję (1.2).

malejące jak funkcja potęgowa odległości $\propto 1/r^\mu$ dla $\mu \geq 1$. Nie omijam również szczególnego przypadku $\mu = d$. Jak dotąd model ten nie doczekał się rozwiązania w dziedzinie czasowej. Poza numerycznymi symulacjami dynamiki cząstki na sieci znajduję analityczne formuły odwzorowujące dokładnie wyniki symulacji. Rozwiązanie analityczne jest możliwe dla układów w reżimie dużego nieporządku, korzystając z przybliżenia centralnego atomu, tj. biorąc pod uwagę jedynie przeskoki pierwszego rzędu.

Cel, treść i struktura pracy

W niniejszej rozprawie przedstawiam wyniki badań prowadzonych przeze mnie w ramach Studiów Doktoranckich na Politechnice Wrocławskiej w latach 2017-2022. Główną strukturę rozprawy stanowi 5 rozdziałów.

Celem rozprawy było określenie oraz teoretyczne wyjaśnienie dynamiki cząstki kwantowej w układzie z silnym nieporządkiem, oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami.

Rozdział 1 ma charakter wprowadzenia do badanego przeze mnie tematu. Przedstawiam w nim dobrze ugruntowaną wiedzę z dziedziny lokalizacji Andersona. Na początku, podaję metody badania lokalizacji, z których jednoznacznie wynika konieczność lokalizacji w układach niskowymiarowych (1D, 2D), natomiast w układzie trójwymiarowym (3D) występowanie przejścia metal-izolator ze względu na wartość nieporządku. Spośród metod wyróżnia się tzw. hipoteza skalowania jednym parametrem, której poświęcam osobny podrozdział. Rozważam również model Andersona, ze sprzężeniami jedynie z najbliższymi sąsiadami. Przedstawiam główne kroki dyskretyzacji hamiltonianu metodą liniowej kombinacji orbitali atomowych, wychodząc od jego standardowej postaci $H = p^2/(2m) + V(r)$. Wyprowadzenie dyskretnego hamiltonianu przygotowuje grunt pod przedstawienie modelu z dalekozasięgowymi sprzężeniami.

Rozdział 2 jest wprowadzeniem do modelu, którego dotyczy moja rozprawa. Wiedza literaturowa przeplata się w nim z otrzymanymi przeze mnie wynikami dotyczącymi tego modelu. Takie przedstawienie tematu podyktowane jest chęcią przekazania całościowego obrazu modelu, który został uzupełniony przez wyniki moich badań. Rozważania rozpoczynam od wprowadzenia pasma energetycznego dla badanego układu oraz określenia efektywnego nieporządku doświadczanego przez cząstkę poruszającą się na sieci. Przedstawiam również wyniki otrzymane na początku XXI wieku [6], które udowadniają możliwość występowania stanów zdelokalizowanych w układach niskowymiarowych, co zmienia nasze rozumienie lokalizacji Andersona. Kolejne podrozdziały służą rozwiązaniu równania Schrödingera w przybliżeniu centralnego atomu. Używając metody z oryginalnego artykułu Andersona [4] znajduję szczytkowe asymptotyczne obsadzenie centralnego węzła, a następnie trójfazową ewolucję obsadzeń pozostałych węzłów, co stanowi podwaliny pod dalsze rozważania.

Rozdziały 3–5 prezentują moje oryginalne wyniki, przy czym część rezultatów zawartych w rozdziałach 3 i 4 została już opublikowana odpowiednio w pracach [5] i [23]. W rozdziale 3 zajmuję się dyfuzją pojedynczego wzbudzenia na regularnej sieci. Przedstawiam dynamikę średniego przemieszczenia kwadratowego, poruszając się cały czas wewnątrz modelu wprowadzonego w Rozdziale 2. Wyniki symulacji numerycznych dotyczą jedynie układu jedno- i dwuwymiarowego dla sprzężenia $V(r) \propto 1/r$. Niemniej jednak analityczne wzory odzwierciedlają zachowanie się układu o dowolnej wymiarowości i ogólnej postaci sprzężenia, co komentuję pod koniec rozdziału.

W Rozdziale 4 zamieszczam wyniki dotyczące rozprzestrzeniania się korelacji w silnie niejednorodnym, jednowymiarowym układzie spinów, w którym doszło do lokalnego wzbudzenia (ang. *local quench*), tj. obrócenia pojedynczego (centralnego) spinu. Kwazicząstka wzbudzenia porusza się wewnątrz układu, powodując powstanie korelacji pomiędzy poszczególnymi spinami a spinem centralnym. Sprężenie pomiędzy atomami, jak poprzednio, ma charakter dalekozasięgowy, $V(r) \propto 1/r^\mu$. Hamiltonian spinowy można sprowadzić, w odpowiedniej bazie, do modelu badanego przeze mnie w poprzednich rozdziałach. Jestem zatem w stanie odtworzyć jakościowo i ilościowo dynamikę korelacji w układzie. Znając dokładną dynamikę korelacji wyznaczam charakter propagacji przez śledzenie „frontu falowego” korelacji na płaszczyźnie czas–położenie. Interesujące jest również określenie istnienia stożka świetlnego, który definiuje się jako obszar w płaszczyźnie czas–położenie, poza którym korelacje gwałtownie spadają do zera. Proponuję postać stożka świetlnego w rozważanym układzie.

W Rozdziale 5 przedstawiam teoretyczne rozważania nad dyfuzją pojedynczego ekscytynu w dwuwymiarowym zespole kropek kwantowych rozmieszczonych losowo na kołowej mesie. Zajmuję się dynamiką średniego przemieszczenia kwadratowego oraz ewolucją obsadzeń kropki w funkcji czasu i odległości od początkowego wzbudzenia. Jakościowo, otrzymane wyniki są podobne do otrzymanych w rozdziale 3. Rozszerzenie zawiera m.in. włączenie efektu dyssypacji przez zadanie skończonego czasu życia cząstki wzbudzenia.

ROZDZIAŁ 1

Lokalizacja Andersona

W tym rozdziale przedstawiam fundamentalne odkrycia w dziedzinie lokalizacji Andersona, tj. lokalizacji cząstki poruszającej się w niejednorodnym ośrodku. Dokonuję krótkiego przeglądu metod, którymi od brzemiennego w skutki artykułu P. W. Andersona [4] (1958) bada się zjawisko lokalizacji. Rola tego wstępu polega na umieszczeniu mojej rozprawy w kontekście odkryć dokonanych w większości w drugiej połowie XX wieku. Przy wyborze, sposobie oraz kolejności prezentacji informacji sugerowałem się pracami [24] i [25]. Rozdział ten nie zawiera żadnych autorskich wyników.

1.1. Metody badania lokalizacji

W tym podrozdziale wymieniam i komentuję wybrane metody badania lokalizacji.

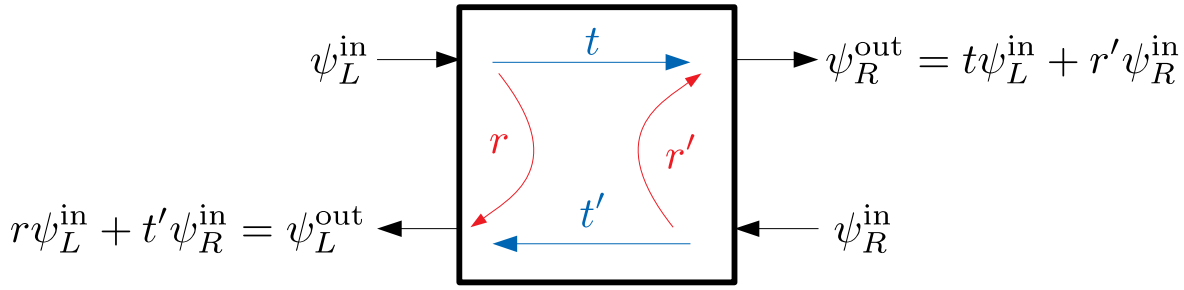
Badanie dynamiki transportu. Śledzenie dynamiki transportu odbywa się poprzez umieszczenie pojedynczej cząstki na węźle sieci i obserwacji jak zmienia się obsadzenie tego węzła po pewnym czasie. Na potrzeby tej rozprawy przyjmuję, że początkowo wzbudzony węzeł to zawsze węzeł centralny. Taką metodę przyjął sam Anderson w [4], udowadniając brak dyfuzji cząstki poruszającej się w trójwymiarowej sieci atomów sprzężonych oddziaływaniem malejącym z odległością $1/r^\mu$ ($\mu > 3$). Metoda użyta przez niego została nazwana po angielsku *locator expansion*¹. Lokalizacja Andersona oznacza brak wykładniczego w czasie zaniku obsadzenia węzła. Cząstka pozostaje zlokalizowana na węźle, choć obsadzenie centralnego węzła może zostać nieznacznie zmniejszone przez wirtualne przeskoki.

W podobny sposób można śledzić rozpływanie się gaussowskiego pakietu falowego. W granicy $t \rightarrow \infty$ malejące wykładniczo z odległością prawdopodobieństwo znalezienia cząstki oznacza lokalizację paczki falowej,

$$(1.1) \quad |\psi(r)|^2 \propto e^{-r/\xi_{\text{loc}}},$$

gdzie ξ_{loc} nazywana jest długością lokalizacji. Klasycznym odpowiednikiem tej metody badania lokalizacji jest śledzenie błędzenia losowego (ang. *random walk*), którego rozwiązanie pokrywa się z przewidywaniami teorii skalowania (zob. podrozdział (1.2)). W mojej rozprawie badam głównie dynamikę transportu dla modelu zaproponowanego przez Andersona w jego oryginalnej pracy tj. dla atomów doświadczających losowego potencjału na węźle oraz sprzężonych dalekozasięgowym sprzężeniem $V(r) \propto 1/r^\mu$. Szczególny wkład mojej rozprawy leży w znalezieniu ewolucji obsadzeń pozostałych węzłów.

¹Pozostawiam tu nazwę angielską z powodu braku, w mojej ocenie, sensownego tłumaczenia na język polski.



Rys. 1.1. Schematyczna ilustracja pojedynczego centrum rozpraszania. Opracowano na podstawie [24].

Lokalizacja stanów własnych. Do zbadania lokalizacji stanów własnych, otrzymanych z diagonalizacji hamiltonianu, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, używa się tzw. stosunku uczestnictwa, a jeszcze częściej, jego odwrotności [26] (IPR)², zdefiniowanej jako

$$(1.2) \quad \text{IPR}(n) := \sum_r |\langle r|n\rangle|^4,$$

dla określonego stanu własnego $|n\rangle$ o energii E_n . Dla stanu możliwie najbardziej zdelokalizowanego (równomierne rozplątanie się cząstki po sieci), $|\langle r|n\rangle|^2 = 1/N$, zatem

$$(1.3) \quad \text{IPR}(n) = \sum_r \frac{1}{N^2} = \frac{1}{N}$$

przyjmuje wartość najniższą (zero w granicy termodynamicznej). Natomiast dla stanu idealnie zlokalizowanego $\langle r|n\rangle = \delta(r)$, $\text{IPR}(n) = 1$, i przyjmuje wartość najwyższą. Brak skalowania się IPR z rozmiarem układu oznacza lokalizację Andersona.

Ciągłość pasma. Znalezienia widma energetycznego danego modelu daje informację o stanach zlokalizowanych. Widmo stanów zdelokalizowanych jest widmem ciągłym, natomiast widmo stanów zlokalizowanych jest widmem dyskretnym (punktowym).

Metoda macierzy transferu [27]. Model układu złożonego z pewnej liczby losowo rozmieszczonych (ale o zadanej gęstości rozmieszczenia) centrów rozpraszania odpowiada zachowaniu się cząstki w niejednorodnym ośrodku. Amplituda fali cząstki poruszającej się odpowiednio po lewej i po prawej stronie przeszkody wyraża się przez

$$(1.4a) \quad \psi_L(z) = \psi_L^{\text{in}} e^{+ikz} + \psi_L^{\text{out}} e^{-ikz},$$

$$(1.4b) \quad \psi_R(z) = \psi_R^{\text{out}} e^{+ikz} + \psi_R^{\text{in}} e^{-ikz}.$$

Relacja pomiędzy amplitudami wyjściowymi (*out*) a wejściowymi (*in*) zadaje tzw. macierz rozpraszania S (zob. Rys. 1.1),

$$(1.5) \quad \begin{pmatrix} \psi_L^{\text{out}} \\ \psi_R^{\text{out}} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \psi_L^{\text{in}} \\ \psi_R^{\text{in}} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix},$$

²Ang. *inverse participation ratio* (IPR).

gdzie t, t', r, r' są, w ogólności, zespolonymi amplitudami prawdopodobieństwa transmisji oraz odbicia na pojedynczym centrum rozpraszania (zob. Rys. 1.1). Prawdopodobieństwo transmisji jest równe $T = |t|^2$, a prawdopodobieństwo odbicia $R = |r|^2$ dla symetrycznej przeszkody $t = t'$ oraz $r = r'$. Znajdując macierz rozpraszania dla układu złożonego z wielu centrów rozpraszania, można wyznaczyć całkowitą transmisję oraz całkowite odbicie od układu. Macierz rozpraszania całego układu nie wyraża się jednak w prosty sposób przez macierze rozpraszania pojedynczych przeszkód. Taką właściwość ma macierz transferu M , która wiąże amplitudy fali biegnącej po lewej i prawej stronie przeszkody,

$$(1.6) \quad \begin{pmatrix} \psi_R^{\text{out}} \\ \psi_R^{\text{in}} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \psi_L^{\text{in}} \\ \psi_L^{\text{out}} \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} 1/t^* & -r^*/t^* \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix}.$$

Macierz transferu dla całego układu jest zwykłym iloczynem macierzy poszczególnych centrów rozpraszania,

$$(1.7) \quad M_{12\dots N} = M_N \times \dots \times M_2 \times M_1.$$

Najpierw, za pomocą macierzy transferu znajduje się transmisję po przejściu przez dwa centra rozpraszania,

$$(1.8) \quad T_{12} = \frac{T_1 T_2}{|1 - \sqrt{R_1 R_2} e^{i\theta}|},$$

gdzie θ jest losową fazą nabytą przez cząstkę przy transmisji. Przyjmując jednostajny rozkład fazy $\theta \sim \mathcal{U}(0, 2\pi)$, można uśrednić powyższe wyrażenie, otrzymując

$$(1.9) \quad T_{12} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2}.$$

Generalizacja na N centrów rozpraszania nie wynika bezpośrednio z relacji dla dwóch centrów gdyż T nie jest addytywne przy dokładaniu nowej przeszkody. Poza tym, gdyby znaleźć transmisję układu N centrów rozpraszania, mnożąc macierze transferu, jak w równaniu (1.7), a następnie ekstrahując transmisję $T_{12\dots N}$ kłopotliwym okazałoby się uśrednianie po całkowitej fazie nabytej przez cząstkę. Stosuje się zatem inną metodę, wprowadzając addytywny współczynnik przeżycia $\kappa = -\ln T = |\ln T|$. Wtedy

$$(1.10) \quad \ln T_{12} = \ln T_1 + \ln T_2 - \ln |1 - \sqrt{R_1 R_2} e^{i\theta}|.$$

Funkcja $\ln |1 - z|$ jest analityczna dla $|z| < 1$, dlatego całka po fazie z trzeciego członu w (1.10) jest równa zero. Po uśrednieniu po fazie θ , pozostaje

$$(1.11) \quad \langle \ln T_{12} \rangle = \ln T_1 + \ln T_2.$$

Znaleziona wartość średniego logarytmu transmisji jest addytywna przy dokładaniu kolejnego centrum rozpraszania. Transmisja przez N jednakowych centrów rozpraszania rozmieszczonych losowo na długości L o średniej gęstości liniowej $n = N/L$ wynosi $\langle \ln T \rangle = Ln |\ln T_1|$, zatem

$$(1.12) \quad T_{\text{typ}} \equiv \exp(\langle \ln T \rangle) = e^{-L/\xi_{\text{loc}}},$$

gdzie $\xi_{\text{loc}} = 1/(n |\ln T_1|)$. Rozkład prawdopodobieństwa $\ln T$ jest zbliżony do rozkładu normalnego (zob. równanie (32) w [24]) i jest wycentrowany w $\langle \ln T \rangle = \ln T_{\text{typ}}$, dlatego T_{typ} jest

wartością najbardziej prawdopodobną tego rozkładu. W jednym wymiarze transmisja maleje wykładniczo z rozmiarem układu, co oznacza lokalizację cząstki.

Klasyczna analogia — błędzenie losowe [28]. Lokalizację lub możliwość delokalizacji można przewidzieć w prostej symulacji błędzenia losowego. W tym celu rozważa się cząstkę na regularnej sieci, która może skakać pomiędzy węzłami z określonym prawdopodobieństwem przeskoku dla każdego możliwego kierunku. Szuka się przy tym prawdopodobieństwa powrotu cząstki do początkowego położenia. W modelu symetrycznym (równe prawdopodobieństwa przeskoku w każdym z kierunków) prawdopodobieństwo powrotu po dowolnie długim czasie dla $d = 1$ oraz $d = 2$ wynosi zawsze 1. Pewny powrót cząstki do położenia początkowego interpretuje się jako lokalizację cząstki.

W przypadku gdy wymiar układu $d = 3$, prawdopodobieństwo powrotu jest mniejsze od jedności, co indukuje możliwość delokalizacji cząstki w układzie, tj. cząstka nigdy nie powróci do początkowego położenia. Takie samo zachowanie cząstki przewiduje teoria skalowania jednym parametrem, której główne wyniki przedstawiam w następnym podrozdziale.

1.2. Teoria skalowania w lokalizacji

Fizycy używają teorii skalowania do badania zachowania się układów o coraz większych rozmiarach $L \rightarrow bL$ ($b > 1$). Metody skalujące są wykorzystywane w teorii pola, fizyce statystycznej, a także w teorii lokalizacji, odkąd tzw. „gang czterech” (ang. *the gang of four*), tj. Abrahams, Anderson, Licciardello oraz Ramakrishnan opublikowali swoją przełomową pracę [8] w 1979 roku. W tym podrozdziale pragnę przedstawić główne wyniki ich artykułu. Robię to nie tylko dlatego, że jest to temat istotny w dziedzinie, której dotyczy moja rozprawa, ale również dlatego, że najnowsze wyniki, prezentowane w kolejnych rozdziałach, pokazują, że istnieją wyjątki od wyników teorii skalowania w lokalizacji, takie jak możliwość występowania stanów zdelokalizowanych w układach niskowymiarowych [6].

W teorii skalowania lokalizacji Andersona bada się zachowanie następującej funkcji

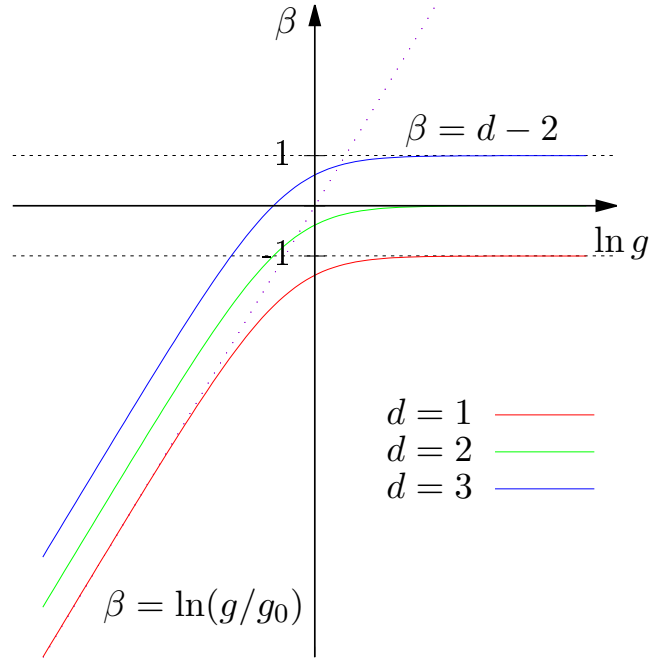
$$(1.13) \quad \beta(g(L)) = L \frac{d \ln g}{dL} = \frac{d \ln g}{d(L/L_0)},$$

będącej pochodną logarytmiczną bezwymiarowej przewodności g względem liniowego rozmiaru układu. Bezwymiarowa przewodność zdefiniowana jest tak, że dla doskonałego izolatora jest ona równa zero, natomiast dla idealnego przewodnika dąży do nieskończoności³. Skalowanie w lokalizacji opiera się na założeniu, że przewodność g skaluje się z rozmiarem układu jak

$$(1.14) \quad g(bL) = f(b, g(L)),$$

tj. nie zależy w jawny sposób od samego rozmiaru układu. Oznacza to, że funkcja β , co zostało zaznaczone w definicji (1.13), wyraża się wyłącznie przez przewodność $g(L)$, nie zależy natomiast jawnie od samego L . Ewolucja $g(L)$ z rozmiarem układu dana jest jednoznacznie przez (1.13). Jeśli $\beta < 0$, przewodność będzie maleć ze wzrostem układu, odwrotnie dla $\beta > 0$.

³Przewodność można wyrazić jako iloraz współczynników transmisji i odbicia $g = T/R$ [24], z czego wynikają jej asymptotyczne wartości.



Rys. 1.2. Schematyczny rysunek funkcji skalującej $\beta(g)$ (1.13). *Opracowano na podstawie [8] oraz [24].*

Przypadek $\beta = 0$, dla pewnej skończonej wartości g , oznacza stan metastabilny, natomiast wartość g w tym punkcie wyznacza przejście fazowe metal-izolator.

W reżimie silnego nieporządku, autorzy w [8] zakładają wykładniczą lokalizację, tj.

$$(1.15) \quad g = g_0 e^{-\alpha L} \Rightarrow \lim_{g \rightarrow 0} \beta = \ln(g/g_0),$$

gdzie stała g_0 jest rzędu jedności. W reżimie przewodzącym natomiast korzysta się z prawa Ohma,

$$(1.16) \quad g(L) \propto L^{d-2},$$

i otrzymuje

$$(1.17) \quad \lim_{g \rightarrow \infty} \beta = d - 2.$$

W sposób schematyczny przedstawiłem funkcję β na Rys. 1.2 dla każdego z trzech wymiarów przestrzennych. W przypadku $d = 1$, β jest zawsze ujemna, co implikuje konieczność lokalizacji. W $d = 2$, chociaż w granicy $g \rightarrow \infty$, β dąży do zera, mała poprawka do wartości asymptotycznej, otrzymana z rachunku zaburzeń, jest ujemna [8], zatem w dwóch wymiarach cząstka również powinna być zlokalizowana. Najciekawszy przypadek stanowi układ trójwymiarowy, w którym β może być dodatnie. Oznacza to, że startując z układu o dostatecznie dużej przewodności, dla której $\beta > 0$, wraz ze wzrostem układu, przewodność będzie liniowo wzrastać. Szybkość wzrostu ograniczona jest przez maksymalną wartość $\beta = 1$. Odwrotnie, jeśli dla niedużego układu $\beta < 0$, w granicy termodynamicznej spodziewać się można lokalizacji. Oznacza to,

że istnieje graniczna wartość g , dla której $\beta = 0$. Ta wartość g wyznacza punkt przejścia fazowego metal-izolator.

1.3. Dyskretyzacja hamiltonianu

W teoretycznej analizie lokalizacji stosuje się model nazywany modelem Andersona⁴ [24]. W tym podrozdziale przedstawiam wyprowadzenie modelu ciasnego wiązania metodą liniowej kombinacji orbitali atomowych (LCAO)⁵. W tym celu rozważam niezależne od czasu równanie Schrödingera dla pojedynczej cząstki w ogólnej postaci

$$(1.18) \quad \left(H_{\text{at}} + \sum_{\beta} V_{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}),$$

gdzie $H_{\text{at}} = p^2/(2m)$, natomiast $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta})$ jest potencjałem działającym na węzeł ze strony pozostałych atomów. $\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$ jest funkcją falową w przestrzeni koordynacyjnej. Dokonam tu dyskretyzacji hamiltonianu (1.18) w przybliżeniu ciasnego wiązania. Dyskretyzacji dokonuję metodą LCAO, tj. zakładając, że

$$(1.19) \quad \Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\gamma} \phi_{\gamma} \chi_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\gamma})$$

jest liniową kombinacją orbitali $\chi_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\gamma})$ wycentrowanych na atomach $\{\gamma\}$, gdzie ϕ_{γ} są, w ogólności zespolonymi, współczynnikami rozwinięcia. Mnożąc powyższe równanie przez $\chi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha})$ oraz całkując po objętości otrzymuję

$$(1.20) \quad \sum_{\gamma} (\epsilon_{\beta} - E) A_{\alpha\gamma} \phi_{\gamma} + \sum_{\beta, \gamma} B_{\alpha\beta\gamma} \phi_{\beta} = 0,$$

gdzie

$$(1.21) \quad A_{\alpha\gamma} = \int d\mathbf{r} \chi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) \chi_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\gamma})$$

jest przekryciem się orbitali atomowych oraz

$$(1.22) \quad B_{\alpha\beta\gamma} = \int d\mathbf{r} \chi_{\alpha}^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\alpha}) V_{\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\beta}) \chi_{\gamma}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\gamma})$$

jest całką przeskoku pomiędzy atomami α a γ przekazywaną przez atom β . Przyjmuje brak przekrycia orbitali sąsiednich atomów,

$$(1.23) \quad A_{\alpha\gamma} = \delta_{\alpha\gamma},$$

natomiast całkę przeskoku można określić w różny sposób. Chociaż oryginalna praca Andersona rozważała przeskoki dalekozasięgowe,

$$(1.24) \quad B_{\alpha\beta\gamma} = \frac{\delta_{\beta\gamma}}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\gamma}|^{\mu}},$$

⁴Modelem Andersona nazywa się albo model ciała stałego z domieszkami magnetycznymi, albo prosty model ciasnego wiązania z losową energią na węzle i sprzężeniami, albo pomiędzy najbliższymi sąsiadami, albo dalekozasięgowym $\propto 1/r^{\mu}$. Ilekroć w tej rozprawie pojawi się model Andersona, używam go w tym drugim znaczeniu uściślając, jaki rodzaj sprzężenia mam w danym momencie na myśli.

⁵Ang. *linear combination of atomic orbitals*.

późniejsze badania skupiły się głównie na modelu ze stałymi przeskokami jedynie do najbliższych sąsiadów

$$(1.25) \quad B_{\alpha\beta\gamma} = -\delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha,\gamma+z}g$$

gdzie $\{\gamma+z\}$ jest zbiorem wszystkich najbliższych sąsiadów węzła γ . Równanie (1.18) przyjmuje dyskretną postać,

$$(1.26) \quad (\epsilon_\alpha - E_\alpha) \Psi_\alpha - g \sum_z \Psi_{\alpha+z} = 0,$$

gdzie sumowanie przebiega po wszystkich z , dla których $\alpha + z$ jest najbliższym sąsiadem α oraz $\epsilon_\alpha = p_\alpha^2/2m$. Dodatkowo zaznaczyłem, że dana wartość własna E_α odpowiada stanowi zlokalizowanemu na węźle α , co jest słuszne dla modelu z założeniem (1.25) lub dla (1.24) ale jedynie w przypadku dużego odchylenia standardowego energii ϵ_α .

Powyższy model odpowiada układowi atomów o pojedynczym sferycznosymetrycznym orbitalu (orbital s) o energii ϵ_α na węźle, mogącym skakać z danego węzła tylko do najbliższych sąsiadów. W bazie stanów zlokalizowanych na węzłach $|\alpha\rangle$ hamiltonian modelu przyjmuje postać

$$(1.27) \quad H = \sum_\alpha \epsilon_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| - g \sum_z (|\alpha+z\rangle\langle\alpha| + |\alpha-z\rangle\langle\alpha|).$$

W jednym wymiarze ($z = \pm 1$) można zapisać równanie (1.26) poprzez macierz transferu,

$$(1.28) \quad \begin{pmatrix} \Psi_{\alpha+1} \\ \Psi_\alpha \end{pmatrix} = \mathcal{P}_\alpha \begin{pmatrix} \Psi_\alpha \\ \Psi_{\alpha-1} \end{pmatrix}, \quad \text{gdzie} \quad \mathcal{P}_\alpha = \begin{pmatrix} \frac{\epsilon_\alpha - E}{g} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tak zdefiniowana macierz $\mathcal{P}_\alpha$ różni się od wprowadzonej w równaniu (1.6), ale posiada tę samą własność — multiplikatywność,

$$(1.29) \quad P_N = \prod_{\alpha=1}^N \mathcal{P}_\alpha,$$

gdzie P_N określa transmisję przez układ N centrów rozpraszania. Macierz P_N można znaleźć numerycznie w prosty sposób zakładając pewien rozkład prawdopodobieństwa energii ϵ_α .

1.4. Rozwiązanie dla układu bez nieporządku

W przypadku braku nieporządku oraz okresowych warunków brzegowych układ jest translacyjny niezmienniczy, zatem jego funkcje falowe mają postać

$$(1.30) \quad \Psi_{\mathbf{k}}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{L^d}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha},$$

gdzie

$$k_j = \frac{2\pi}{N} n, \quad n = -[N/2], \dots, 0, \dots, [N/2] - 1, \quad j = x, y, z$$

jest j -tą składową wektora falowego. Wstawiając (1.30) do równania (1.26) otrzymuje się pasmo w przestrzeni wektora falowego,

$$(1.31) \quad E_{\mathbf{k}} = -2g \sum_{j=x,y,z} \cos(k_j).$$

Uwzględniając zależność czasową otrzymuje się

$$(1.32) \quad \Psi(t, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{L^d}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha + 2itg \sum_{j=1}^d \cos(k_j)}.$$

W granicy termodynamicznej, sumę można zamienić na całkę

$$(1.33) \quad \Psi(t, \alpha) = \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik_j r_{\alpha,j} + 2tg \cos(k)} dk \right]^d = \prod_{j=1}^d i^{r_{\alpha,j}} J_{r_{\alpha,j}}(2tg).$$

gdzie $J_{r_{\alpha,j}}(z)$ jest funkcją Bessela pierwszego rodzaju⁶. Interesować mnie będzie obsadzenie centralnego węzła ($\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{0}$) po długim czasie,

$$(1.34) \quad \Psi(t \rightarrow \infty, 0) \propto 1/t^{d/2},$$

w pierwszym rzędzie rozwinięcia (1.33) w szereg względem czasu leżącego w nieskończoności ($t \rightarrow \infty$). W granicy długiego czasu obsadzenie centralnego węzła maleje, będzie on zatem zdelokalizowany na sieci, co jest przewidywalnym wynikiem dla układu bez nieporządku.

Z zależności (1.31) można obliczyć gęstość stanów. W układzie jednowymiarowym wyraża się ona przez

$$(1.35) \quad \rho_{1D}(E) = \frac{1}{\pi} \frac{dk}{dE} = \frac{1}{\pi \sqrt{4g^2 - E^2}}.$$

W wyższych wymiarach i na sieciach regularnych (kwadratowej w 2D i kubicznej w 3D) można obliczyć gęstość stanów za pomocą wzoru

$$(1.36) \quad \rho_d = -\frac{1}{\pi} \Im \int_{\mathbf{k} \in [-\pi, \pi]^d} G_d(E + is; \mathbf{k}) d\mathbf{k},$$

gdzie funkcja podcałkowa w powyższym wyrażeniu jest diagonalnym elementem macierzowym funkcji Greena dla układu o d wymiarach przestrzennych,

$$(1.37) \quad G_d(E + is; \mathbf{k}) = [E + is - E_{\mathbf{k}}]^{-1}.$$

I tak, autorzy w [30] obliczają gęstość stanów dla sieci kwadratowej (2D) jako

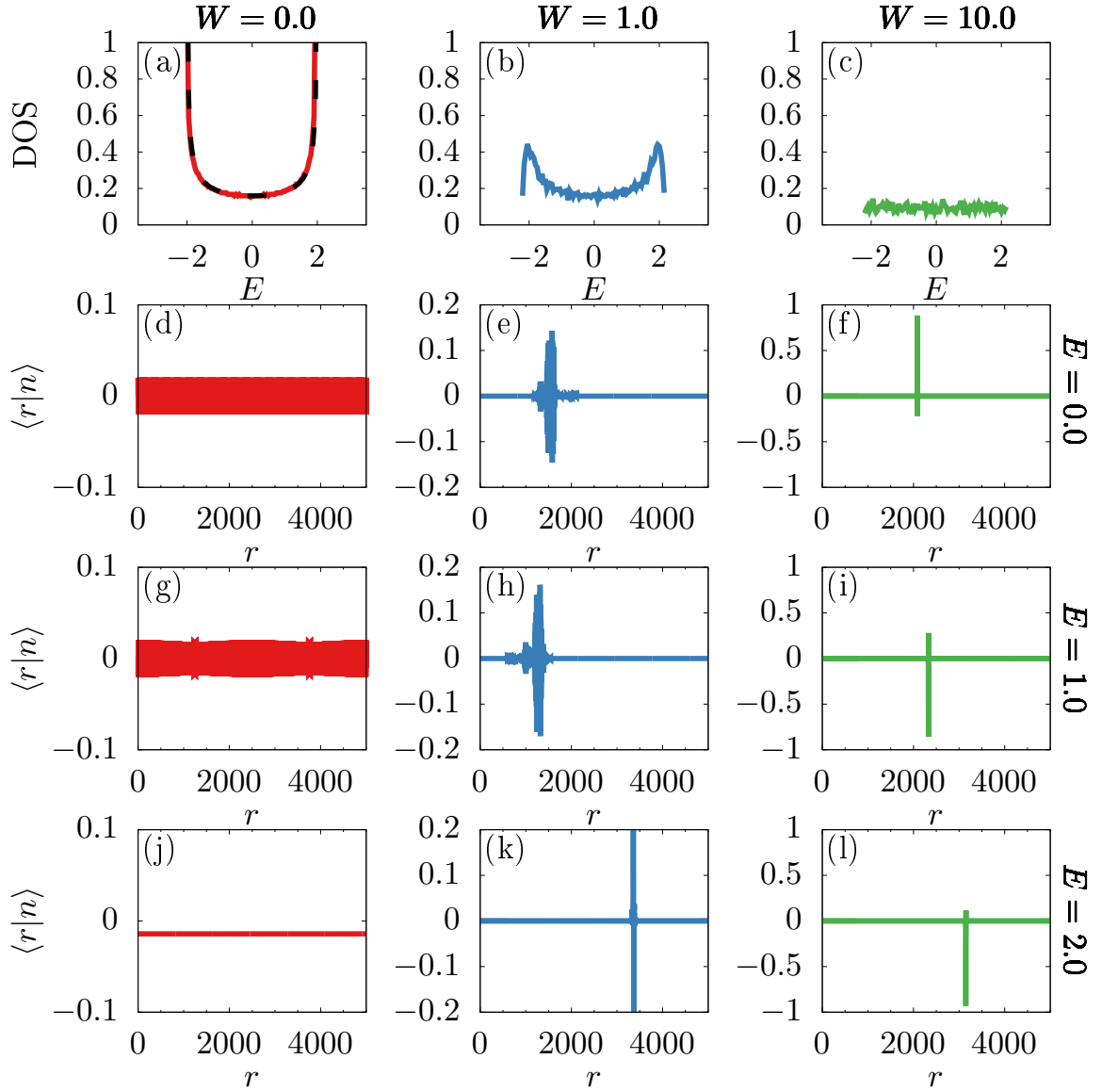
$$(1.38) \quad \rho_{2D} = \frac{1}{2\pi^2} K \left(\sqrt{1 - \frac{E^2}{16}} \right),$$

gdzie

$$(1.39) \quad K(k) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}}$$

⁶Skorzystałem z całkowitej reprezentacji funkcji Bessela pierwszego rodzaju w [29],

$$J_n(x) = \frac{i^{-n}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(n\theta + x \cos \theta)} d\theta.$$

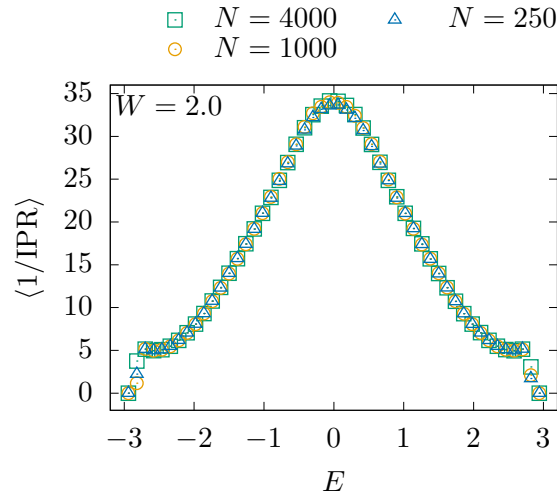


Rys. 1.3. (a-c) Gęstość stanów (histogram stanów energetycznych) dla pojedynczej realizacji nieporządku dla trzech różnych wartości siły nieporządku $W = 0, 1, 10$. (d-l) (De)lokalizacja stanów własnych o trzech różnych energiach (w wierszach) dla układu o zadanych wartościach siły nieporządku (w kolumnach). Opracowano na podstawie [32].

jest zupełną całką eliptyczną pierwszego rodzaju. Gęstość stanów można znajdować analitycznie, korzystając z (1.36), jednak według mojego stanu wiedzy, najczęściej gęstość stanów liczy się numerycznie dla zadanego modelu (zob. [31]).

1.5. Rozwiązanie numeryczne dla układu jednowymiarowego

W tym podrozdziale komentuję standardowe wyniki symulacji modelu Andersona ze sprzężeniami najbliższych sąsiadów wprowadzonego w (1.27). W obliczeniach przyjęto okresowe warunki brzegowe, $g = -1$ oraz $\epsilon_\alpha \sim \mathcal{U}(-W/2, W/2)$. Symulacje numeryczne wykonałem przy



Rys. 1.4. Średni stosunek uczestnictwa $\langle 1/IPR \rangle$ w funkcji energii dla modelu zadanego hamiltonianem (1.27) dla trzech różnych rozmiarów łańcucha.

Opracowano na podstawie [32].

pomocy programu napisanego przez D. Delande [32], w którym dokonałem zmian na potrzeby tej rozprawy.

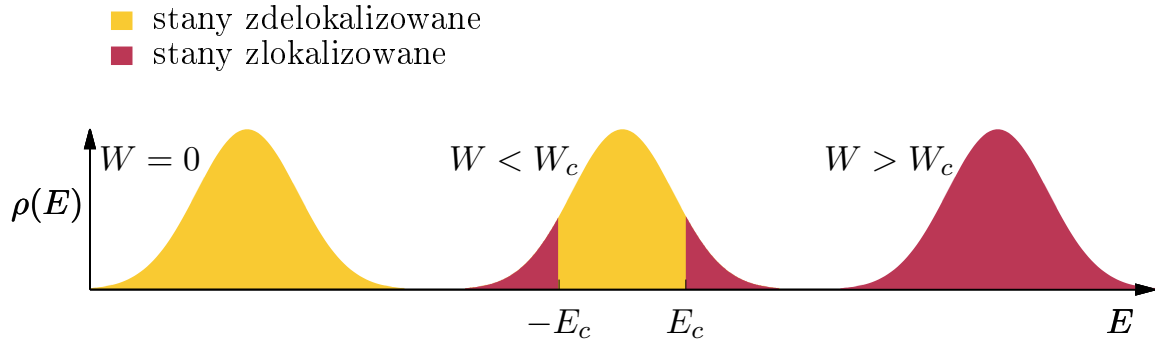
Na Rys. 1.3(a-c) przedstawiam gęstość stanów dla modelu (1.27) dla różnych wartości nieporządku. Rysunek 1.3(a) odpowiada gęstości stanów dla układu czystego (bez nieporządku). Czarną przerywaną linią narysowałem znaną relację dla gęstości stanów (1.35), która doskonale pasuje do wyników symulacji. Energie pasma czystego układu przyjmują wartości z przedziału $[-2, 2]$. Na krawędziach pasma gęstość stanów jest rozbieżna do $+\infty$. Gdy pojawia się nieporządek, rozbieżność znika, a na krawędziach pasma pojawiają się ogony wykraczające poza przedział $[-2, 2]$ nazywane ogonami Lifshitz'a. Na Rys. 1.3(d-l) przedstawiam stany własne o zadanej energii $E = 0.0, 1.0, 2.0$ oraz dla różnych wartości siły nieporządku. W przypadku braku nieporządku stany rozkładają się równomiernie po całym łańcuchu (d, g, j), natomiast w przypadku występowania nieporządku, stan jest zawsze zlokalizowany w przestrzeni, co oddaje wąski szczyt dla pewnej wartości r .

Dodatkowo obliczyłem średni stosunek uczestnictwa, który przedstawiam na Rys. 1.4. Najważniejszym efektem widocznym na rysunku jest brak skalowania się stosunku uczestnictwa z rozmiarem, co odpowiada stanom całkowicie zlokalizowanym. Ilościowo większe i mniejsze wartości stosunku uczestnictwa odpowiadają proporcjonalnie większym i mniejszym wartościom długości lokalizacji. Stany o energiach najwyższych mają najkrótszą długość lokalizacji, natomiast stan o energii zerowej ma najdłuższą długość lokalizacji, czyli jest najsilniej zlokalizowany.

1.6. Granica ruchliwości

Odkąd jasnym się stało, że w układzie trójwymiarowym istnieje przejście fazowe metalizator, interesującą kwestią stało się domniemane istnienie tzw. granicy ruchliwości⁷. Granica ruchliwości jest wartością energii w paśmie energetycznym rozdzielającą stany zlokalizowane

⁷Ang. *mobility edge*.



Rys. 1.5. Schematyczny rysunek gęstości stanów, na którym zaznaczono udział stanów zlokalizowanych (kolor czerwony) oraz stanów zdelokalizowanych (kolor żółty) w trzech różnych jakościowo sytuacjach: (a) dla układu czystego tj. bez nieporządku; (b) dla układu z umiarkowanym nieporządkiem, tj. niższym niż graniczna wartość W_c , dla której zachodzi przejście fazowe metal-izolator; (c) dla nieporządku przekraczającego graniczną wartość nieporządku, co skutkuje lokalizacją wszystkich stanów pasma.

od zdelokalizowanych. Economou oraz Cohen [33] wykazali w 1970 r. istnienie granicy ruchliwości, przy czym stany zlokalizowane leżą symetrycznie na krawędziach pasma, natomiast stany zdelokalizowane – w środku pasma (zob. Rys. 1.5). W miarę wzrostu nieporządku granica ruchliwości E_c przesuwa się do wewnątrz pasma, aż do momentu całkowitego zaniku stanów zdelokalizowanych. W modelu Andersona (diagonalny nieporządek oraz przeskoki tylko do najbliższych sąsiadów) znaleziono wartość krytyczną nieporządku, dla której następuje lokalizacja wszystkich stanów pasma. Dla jednorodnego rozkładu energii $\epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$ wartość krytyczna nieporządku wynosi $W_c \approx 2.7B$, gdzie B jest szerokością pasma. O przejściu metal izolator mówimy w dwóch różnych znaczeniach, pierwszym, jako przekroczenie wartości krytycznej W_c , dla której znikają zupełnie stany zdelokalizowane. Rzadziej, w drugim znaczeniu, gdy zmienia się charakter (zdelokalizowany $\leftrightarrow$ zlokalizowany) stanu w zależności od energii stanu.

Model Andersona z całką przeskoku malejącą potęgowo z odległością

W tym rozdziale wprowadzam model badany przeze mnie w ramach niniejszej rozprawy. Jest to model Andersona z dalekozasięgową całką przeskoku malejącą z pewną potęgą odległości, $V(r) \propto 1/r^\mu$. Prezentuję hamiltonian wyrażony w drugim kwantowaniu oraz w bazie stanów zlokalizowanych na węźle (podrozdział 2.1). Następnie znajduję pasmo energetyczne oraz wyrażam hamiltonian w bazie stanów własnych wektora falowego (podrozdział 2.2). Dodatkowo znajduję efektywną wartość nieporządku odczuwanego przez cząstkę w układzie jako średni pozadiagonalny element hamiltonianu w przestrzeni odwrotnej (podrozdział 2.3). Dalej przedstawiam argumentację pochodzącą oryginalnie z [6, 34], dowodzącą, że nawet w układach niskowymiarowych (1D, 2D) z nieskorelowanym nieporządkiem mogą występować stany zdelokalizowane prowadzące do przejścia metal-izolator ze względu na zasięg sprzężeń działających w układzie zadany przez wykładnik μ (podrozdział 2.4).

Na szczególne potraktowanie zasługuje model, w którym sprzężenie maleje z odległością jak r^{-d} , gdzie d jest wymiarem przestrzennym układu. W tym układzie energie na krawędziach pasma są rozbieżne. Pokazuję jednak, że stany krawędziowe w granicy termodynamicznej nie mają znaczenia, gdyż ich względna liczba maleje do zera (podrozdział 2.5).

W kolejnych podrozdziałach zajmuję się rozwiązaniem równania ruchu dla badanego modelu. Wyprowadzam najpierw wynik otrzymany oryginalnie przez P. W. Andersona w [4]. Mianowicie interesuje mnie, jak rozprzestrzenia się po sieci pojedyncza cząstka w reżimie silnego nieporządku. W tym celu stosuję przybliżony „model centralnego atomu”, w którym rozważa się sprzężenia jedynie z początkowo obsadzonym węzłem, co jest słuszne dla silnie niejednorodnych energii. Otrzymuję asymptotyczne obsadzenie centralnego węzła (podrozdział 2.7). Następnie, w dalszym ciągu posługując się modelem centralnego atomu, znajduję ewolucję w czasie obsadzenia na pozostałych węzłach (podrozdział 2.10), która ma trzy wyraźne fazy — kwadratową w czasie, liniową w czasie oraz wysycenia (podrozdział 2.12). Taką samą dynamikę otrzymuje się w „modelu dwóch atomów” (podrozdział 2.10), co jest zrozumiałe, gdy weźmie się pod uwagę, że w modelu centralnego węzła, każdy z atomów jest najbliższym sąsiadem atomu centralnego.

Znalezienie dynamiki obsadzeń uważam za najważniejsze osiągnięcie niniejszej rozprawy, które wykorzystuję następnie w rozdziałach 3–5 dla dokładnego odwzorowania wyników symulacji numerycznych oraz ich głębszego zrozumienia.

2.1. Opis modelu

Rozważam hamiltonian postaci

$$(2.1) \quad H = J \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\beta} \right),$$

gdzie $a_{\alpha}^{\dagger}$ oraz a_{α} są, odpowiednio, bozonowymi operatorami kreacji i anihilacji (kwazi)cząstki na węźle α , J zadaje całkowitą skalę energii, $J\epsilon_{\alpha}$ jest energią na węźle α . Energie $\{\epsilon_{\alpha}\}$ są nieskorelowanymi zmiennymi losowymi pochodzącymi z pewnego rozkładu prawdopodobieństwa. W ramach mojej rozprawy skupiam uwagę głównie na symetrycznym rozkładzie jednostajnym o szerokości W [$\epsilon_{\alpha} \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$] oraz symetrycznym rozkładzie normalnym o odchyleniu standardowym σ [$\epsilon_{\alpha} \in \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma)$]. Sprzężenia pomiędzy węzłami $JV_{\alpha\beta}$ mają charakter dalekozasięgowy, tj. maleją z pewną potęgą odległości pomiędzy węzłami (por. równanie (1.24)),

$$(2.2) \quad V_{\alpha\beta} = \frac{1}{|\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\beta}|^{\mu}},$$

gdzie $\mathbf{r}_{\alpha}$ oraz $\mathbf{r}_{\beta}$ są położeniami węzłów α i β na, w ogólności, d -wymiarowej regularnej sieci krystalicznej o jednostkowej stałej sieciowej (przestrzeń $\mathbb{Z}^d$) z periodycznymi warunkami brzegowymi. Hamiltonian (2.1) można również wyrazić w bazie stanów zlokalizowanych na węźle $\{|\alpha\rangle\}$,

$$(2.3) \quad H = J \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} |\alpha\rangle\langle\beta| \right),$$

w których także wyraża się wektor stanu całego układu

$$(2.4) \quad |\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha}(t) |\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle = a_{\alpha}^{\dagger} |\text{vac}\rangle,$$

gdzie $|\text{vac}\rangle$ oznacza stan sieci nieobsadzonej przez żadną cząstkę, natomiast $c_{\alpha}(t)$ są zależnymi od czasu współczynnikami rozwinięcia będącymi amplitudami prawdopodobieństwa znalezienia cząstki na węźle α . Dodatkowo pragnę w tym miejscu wyrazić hamiltonian układu w kategoriach operatorów spinowych. Niekiedy równoważnie do operatorów kreacji i anihilacji w drugim kwantowaniu można rozpatrywać operatory podnoszące i opuszczające wartość momentu pędu, a w szczególności spinu. Początkowy stan układu $|\text{ini}\rangle \equiv |\text{vac}\rangle$ oznacza układ, w którym wszystkie spiny spolaryzowane są w jednym kierunku, np. w górę,

$$(2.5) \quad |\text{ini}\rangle = \bigotimes_{\alpha} |\uparrow\rangle_{\alpha} = \underbrace{|\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle}_N.$$

Operator $\hat{\sigma}_{-}^{\alpha} = \hat{\sigma}_x^{\alpha} - i\hat{\sigma}_y^{\alpha}$ obraca spin o numerze α w dół, natomiast operator $\hat{\sigma}_{+}^{\alpha} = \hat{\sigma}_x^{\alpha} + i\hat{\sigma}_y^{\alpha}$ obraca ten sam spin w górę, gdzie $\hat{\sigma}_i^{\alpha}$, $i = x, y, z$ będące macierzami Pauliego są jednocząstkowymi operatorami działającymi na węźle α . Jeśli w układzie występuje tylko jedno wzbudzenie spinowe stan układu opisywany jest funkcją $|\Psi\rangle$ wyrażoną równaniem (2.4) z tym że teraz $|\alpha\rangle = \hat{\sigma}_{-}^{\alpha} |\text{ini}\rangle$. Hamiltonian (2.1) [(2.3)] przyjmuje postać

$$(2.6) \quad H = J \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{\sigma}_{+}^{\alpha} \hat{\sigma}_{-}^{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} \hat{\sigma}_{+}^{\alpha} \hat{\sigma}_{-}^{\beta} \right)$$

lub

$$(2.7) \quad H = J \left[2 \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} (1 + \sigma_z^{\alpha}) + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} \left(\sigma_x^{\alpha} \sigma_x^{\beta} + \sigma_y^{\alpha} \sigma_y^{\beta} \right) \right].$$

Rozważany model jest więc kwantowym modelem XY z nieporządkiem.

Dla układu o skończonym rozmiarze liniowy rozmiar układu będą oznaczał jako L , natomiast całkowitą liczbę atomów w układzie jako $N = L^d$. Zasadniczo rozważam układy, dla których $\mu \geq d$ (choć rozdziały 3 oraz 5 zawierają również analizę układów z $\mu < d$), przy czym $\mu = d$ jest przypadkiem szczególnym, w którym energia w centrum pasma rozbiega się do nieskończoności. Ten szczególny przypadek rozważę osobno, by pokazać, że stany krawędziowe o nieskończonych energiach są nieistotne w granicy termodynamicznej, gdyż ich względna liczba maleje wraz ze wzrostem układu, zatem ich procentowy udział w paśmie dąży do zera.

Przedstawiony przez mnie model został już wspomniany w poprzednim rozdziale (zob. równanie (1.24)). Różni się on zasadniczo od modelu z całą przeskoku jedynie pomiędzy najbliższymi sąsiadami, nie tylko dlatego, że każdy węzeł sieci jest połączony ze wszystkimi pozostałymi, ale również dlatego, że zanik całki przeskoku jest wolniejszy niż wykładniczy. Można się zatem spodziewać, że przewidywania dotyczące lokalizacji przedstawione w rozdziale 1 nie będą się w pełni stosować do tego nowego modelu.

2.2. Pasma energetyczne

W tym podrozdziale transformuję hamiltonian (2.3) do przestrzeni odwrotnej (przestrzeni wektora falowego).

Ponieważ badam układ periodyczny, stany własne wektora falowego mogę przyjąć jako

$$(2.8) \quad |\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha}} |\alpha\rangle,$$

gdzie

$$(2.9) \quad k_i = \frac{2\pi}{L} n, \quad i = 1, \dots, d, \quad n = -[L/2], \dots, [L/2] - 1$$

jest i -tą składową wektora falowego. Pierwsza strefa Brillouina przebiega zatem po¹ $\mathbf{k} \in [-\pi, \pi]^d$. Obliczając elementy macierzowe $\langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k}' \rangle$ hamiltonianu (2.3) w bazie stanów (2.8) znajduję

$$(2.10) \quad H = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'} (\delta \mathcal{H})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}'|,$$

gdzie

$$(2.11) \quad E_{\mathbf{k}} = \sum_{\alpha, \mathbf{r}_{\alpha} \neq \mathbf{0}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\alpha}}}{|\mathbf{r}_{\alpha}|^{\mu}}$$

jest zależnością dyspersyjną energii dla układu bez nieporządku, natomiast

$$(2.12) \quad (\delta \mathcal{H})_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}_{\alpha}}$$

jest macierzą rozpraszania.

¹Możliwy jest też wybór $\mathbf{k} \in [0, 2\pi]^d$.

Aby suma w (2.11) pozostała zbieżna, w granicy termodynamicznej, wykładnik μ powinien przewyższać wymiarowość układu ($\mu > d$). Szczególny przypadek $\mu = d$ oznacza, że w granicy termodynamicznej, występuje rozbieżna do nieskończoności krawędź pasma (dla $k = 0$).

2.3. Efektywny nieporządek

Średni pozadiagonalny element macierzowy macierzy rozpraszania określa efektywny nieporządek σ_{eff} odczuwany przez cząstkę na sieci [6]. Jest on odpowiedzialny za ewentualne lokalizowanie się stanu własnego o zadanej energii. Lokalizacja następuje, gdy efektywny nieporządek znacząco przewyższa separację poziomów energetycznych ($\sigma_{\text{eff}} \gg \delta E$). W tym akapicie wyprowadzam wartość tego efektywnego nieporządku, jaki odczuwa cząstka na sieci. Wariancja macierzy rozpraszania wynosi

$$\begin{aligned}
 \langle |(\delta \mathcal{H})_{kk'}|^2 \rangle &= \left\langle \left| \frac{1}{N} \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_{\alpha}} \right|^2 \right\rangle \\
 (2.13) \quad &= \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{\alpha, \alpha'} \epsilon_{\alpha} \epsilon_{\alpha'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'})} \right\rangle \\
 &= \frac{1}{N^2} \sum_{\alpha, \alpha'} \langle \epsilon_{\alpha} \epsilon_{\alpha'} \rangle e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r}_{\alpha} - \mathbf{r}_{\alpha'})}.
 \end{aligned}$$

Ponieważ energie ϵ_{α} są niezależnymi zmiennymi losowymi pochodzącymi z tego samego rozkładu prawdopodobieństwa,

$$(2.14) \quad \langle \epsilon_{\alpha} \epsilon_{\alpha'} \rangle = \langle \epsilon^2 \rangle \delta_{\alpha\alpha'} = \sigma^2 \delta_{\alpha\alpha'},$$

gdzie σ^2 jest wariancją rozkładu energii ϵ_{α} . Zatem średni element macierzy rozpraszania wynosi

$$(2.15) \quad \langle |(\delta \mathcal{H})_{kk'}|^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{\alpha} \sigma^2 = \frac{\sigma^2}{N},$$

natomiast odchylenie standardowe macierzy rozpraszania wynosi

$$(2.16) \quad \sigma_{\text{eff}} \equiv \sqrt{\langle |(\delta \mathcal{H})_{kk'}|^2 \rangle} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} = \frac{\sigma}{L^{d/2}}.$$

W następnym podrozdziale pokazuję za [6, 34], że ze względu na to, iż σ_{eff} maleje wolniej niż separacja poziomów energetycznych w środku pasma, możliwa jest delokalizacja centralnych stanów energetycznych.

2.4. Przejście metal-izolator w układach niskowymiarowych

W tym podrozdziale przedstawiam argumentację [6, 34] dowodzącą, że w pewnym przedziale wykładnika μ możliwe jest występowanie stanów zdelokalizowanych nawet w układach niskowymiarowych (1D, 2D) na krawędzi pasma energetycznego.

Relacje dyspersyjne energii, E_k , na krawędziach pasma oraz w jego centrum są różne. Inne są zatem także separacje poziomów energetycznych względem liniowego rozmiaru układu L . Można pokazać, co zostało zauważone i przeprowadzone w [6, 34], że w granicy termodynamicznej separacja poziomów energetycznych na krawędzi pasma osiągnie wartość mniejszą niż

odczuwany przez atomy efektywny nieporządek. Jeśli mianowicie $\sigma_{\text{eff}} \ll \delta E$ stany są ze sobą słabo sprzężone, a zatem powinny być zdelokalizowane.

Rozwinięcie pasma energetycznego w środku i na krawędzi pasma wyraża się przez [6, 34]

$$(2.17a) \quad E_{\mathbf{k}} \simeq E_0 - A_d(\mu)|\mathbf{k}|^{\mu-d}, \quad \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0} \text{ (górną krawędź pasma),}$$

$$(2.17b) \quad E_{\mathbf{k}} \simeq E_{\pi} + B_d(\mu)|\mathbf{k} - \boldsymbol{\pi}|^2, \quad \mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi} \text{ (dolną krawędź pasma),}$$

gdzie $A_d(\mu)$ oraz $B_d(\mu)$ są stałymi rzędu jednośc, oraz

$$(2.18a) \quad E_0 = 2J \sum_{\alpha, \mathbf{r}_{\alpha} \neq 0} \frac{1}{|\mathbf{r}_{\alpha}|^{\mu}},$$

$$(2.18b) \quad E_{\pi} = 2J \sum_{\alpha, \mathbf{r}_{\alpha} \neq 0} \frac{(-1)^{\mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{I}}}{|\mathbf{r}_{\alpha}|^{\mu}},$$

gdzie $\mathbf{I}$ jest d -wymiarowym wektorem, złożony z samych jedynek. Zgodnie z równaniem (2.17) oraz równaniem (2.9) separacja poziomów energetycznych

$$(2.19a) \quad \delta E \propto N^{d-\mu} \quad \mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0} \text{ (górną krawędź pasma),}$$

$$(2.19b) \quad \delta E \propto N^{-2} \quad \mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi} \text{ (dolną krawędź pasma).}$$

Efektywny nieporządek maleje natomiast z rozmiarem układu jak $\sigma_{\text{eff}} \sim N^{-d/2}$. Oznacza to, że separacja stanów na górnej krawędzi pasma dla $1 < \mu < 3d/2$ maleje wolniej niż efektywny nieporządek. Oznacza to, że jeśli sprzężenie σ_{eff} było niewielkie, wraz ze wzrostem układu będzie jeszcze mniejsze, w szczególności mniejsze niż δE . Oznacza to, że w górnej granicy pasma mogą występować stany zdelokalizowane. W badanym modelu występuje zatem przejście metal-izolator ze względu na wartość wykładnika μ .

2.5. Pasma energetyczne w szczególnym przypadku $\mu = d$

A. $d = 1$. W tym podrozdziale pokażę, że dla $\mu = d = 1$, pomimo iż energia na krawędzi pasma jest rozbieżna (dąży do nieskończoności), liczba rozbieżnych stanów w granicy termodynamicznej jest zanedbywalnie mała. Prowadzone tutaj rozważania są nowatorskim wkładem niniejszej rozprawy do wiedzy o badanym modelu. W jednym wymiarze $N \equiv L$ oraz $r_{\alpha} \equiv \alpha$. W tym szczególnym przypadku, pasmo energetyczne (w granicy termodynamicznej) ma postać

$$(2.20) \quad \begin{aligned} E_k &= 2\Re \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{e^{ik\alpha}}{\alpha} = 2\Re \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{(e^{ik})^{\alpha}}{\alpha} \\ &= -2\Re \ln(1 - e^{ik}) - 2 \ln|1 - e^{ik}| \\ &= -2 \ln \left| 2 \sin \left(\frac{k}{2} \right) \right|, \end{aligned}$$

gdzie skorzystałem z zależności

$$(2.21) \quad \sum_{\alpha=1}^{\infty} \frac{q^{\alpha}}{\alpha} = -\ln(1 - q).$$

Dla $k = 0$ energia E_k rozbiega się do $+\infty$. dla skończonego układu jednak można określić górną granicę energii,

$$(2.22) \quad E_{\max} = 2 \sum_{\alpha=1}^{\lfloor L/2 \rfloor} \frac{1}{|\alpha|} \propto 2 \ln \left(\frac{L}{2} \right),$$

co jest słuszne dla dostatecznie dużych układów. Separację pomiędzy poziomami energetycznymi obliczam jako

$$(2.23) \quad \delta E = \left| \frac{dE_k}{dk} \right| \delta k = \operatorname{ctg} \left(\frac{k}{2} \right) \frac{2\pi}{L} \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{2}{k} \frac{2\pi}{L},$$

gdzie korzystam z tego, że

$$(2.24) \quad \left| \frac{dE_k}{dk} \right| = \operatorname{ctg} \left(\frac{k}{2} \right) \stackrel{k \rightarrow 0}{\approx} \frac{2}{k}.$$

Dodatkowo warto zauważyć, że z (2.23) wynika, że w pobliżu górnej krawędzi pasma ($k = 0$) $\delta E = \mathcal{O}(1)$ dla $L \rightarrow \infty$. Odległości pomiędzy poziomami energetycznymi nie zmieniają się zatem z rozmiarem układu. Dodatkowo, korzystając z przybliżonego wyniku w (2.24), wektor falowy może być wyrażony przez

$$(2.25) \quad k \approx e^{-E_k/2},$$

a separacja poziomów (2.23), jako

$$(2.26) \quad \delta E = \frac{4\pi}{L} e^{E_k/2}.$$

Separacja pomiędzy kolejnymi stanami rośnie w miarę wzrostu bezwzględnej wartości energii. Chcę znaleźć liczbę stanów, dla których separacja poziomów energetycznych jest większa od σ_{eff} . Są to stany, które mogą być zdelokalizowane. W szczególności należą do nich stany na krawędzi pasma. Najpierw rozważę problem ogólnie, tj. znajdę liczbę stanów, dla których separacja energii jest większa od pewnej wartości δE_0 ($\delta E > \delta E_0$). Korzystając z równania (2.26) otrzymuję warunek na energie,

$$(2.27) \quad E_k < -2 \ln \left(\frac{N}{4\pi} \delta E_0 \right),$$

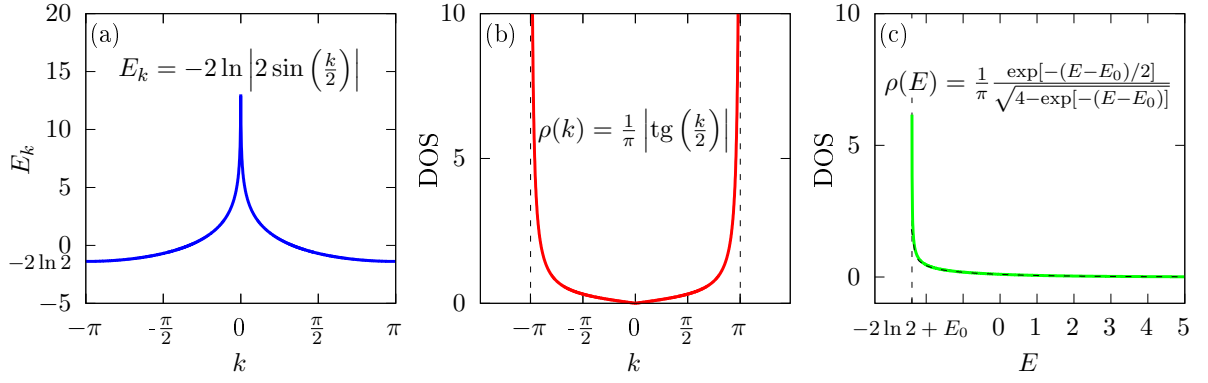
natomiast łącząc powyższe równanie z równaniem (2.23) otrzymuję warunek na wektor falowy

$$(2.28) \quad k < \frac{4\pi}{L \delta E_0}, \quad \text{dla } k \rightarrow 0.$$

Względna liczba stanów (tj. liczba stanów względem rozmiaru układu L) wynosi k/π . Korzystając zatem z (2.28) dostaję względną liczbę stanów, dla których separacja energii jest większa od $\delta E_0 = \sigma_{\text{eff}} = \sigma/\sqrt{L}$,

$$(2.29) \quad \frac{k}{\pi} < \frac{4}{\sqrt{L}\sigma}.$$

W granicy termodynamicznej względna liczba rozbieżnych stanów dąży do zera. Innymi słowy, procentowy udział tych stanów jest znikomy. Dochodzi się zatem do tego, że stany, których rozbieżność wynika z nieograniczoności układu, znikają w granicy termodynamicznej. Dodatkowo, stany w pobliżu $k = 0$, które z pewnością są zdelokalizowane, również nie mają znaczenia. Nie



Rys. 2.1. (a) Pasmo energetyczne dla jednowymiarowego łańcucha ze sprzężeniami $\propto 1/r^\mu$. (b) Gęstość stanów dla relacji dyspersji przedstawionej w (a). (c) Gęstość stanów w funkcji energii.

oznacza to jednak, że pozostałe stany pasma są zlokalizowane. Wyzwaniem pozostaje nadal znalezienie granicy ruchliwości dla tego szczególnego przypadku.

Dodatkowo na Rys. 2.1 przedstawiam relację (2.20) oraz odpowiadające jej gęstości stanów w funkcji wektora falowego oraz energii. Widoczna jest rozbieżność energii w $k = 0$ [Rys. 2.1(a)]. Gęstość stanów w centrum pasma wynosi zero [Rys. 2.1(b)]. Podobnie gęstość stanów o zwiększającej się energii dąży do zera [Rys. 2.1(c)].

B. $d = 2$. Pasmo w układzie dwuwymiarowym ma postać

$$\begin{aligned}
 E_{\mathbf{k}} &= \sum_{\alpha, \mathbf{r}_\alpha \neq \mathbf{0}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_\alpha}}{|\mathbf{r}_\alpha|^2} \\
 &= \sum_{\substack{m,n \\ m^2+n^2 \neq 0}} \frac{e^{ik_x m + ik_y n}}{m^2 + n^2},
 \end{aligned}
 \tag{2.30}$$

gdzie oznaczyłem $\mathbf{r}_\alpha = (x_\alpha, y_\alpha) \equiv (m, n) \in \mathbb{Z}^2$. Energia dla $\mathbf{k} = \mathbf{0} \equiv (0, 0)$ jest rozbieżna w granicy termodynamicznej,

$$\begin{aligned}
 \sum_{\substack{m,n \\ m^2+n^2 \neq 0}} \frac{1}{m^2 + n^2} &\geq \sum_{\substack{m,n \\ m^2+n^2 \neq 0}} \frac{1}{(m+n)^2} \\
 &= 2 \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^l \frac{1}{l^2} = \underbrace{2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l}}_{\text{suma rozbieżna}} + \underbrace{2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^2}}_{\text{suma zbieżna}} \rightarrow \infty,
 \end{aligned}
 \tag{2.31}$$

gdzie w ostatnim kroku skorzystałem z tego, że liczba możliwych kombinacji, aby suma $(m+n)$ była równa l wynosi $\sum_{m=0}^l 1 = l+1$. Możliwe jest dokonanie oszacowania całkowitego, które określa rozbieżność $E_{\mathbf{k}}$,

$$E_{\mathbf{k}} \approx \int_{\mathbb{R}^2 \setminus D} d^2 r \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}}{r^2},
 \tag{2.32}$$

gdzie całkowanie przebiega po płaszczyźnie $\mathbb{R}^2$ z wyłączeniem kołowego obszaru D o środku w $\mathbf{r} = 0$ o promieniu $1/2$. Całkowania w (2.32) można dokonać po transformacji zmiennych do układu biegunowego,

$$(2.33) \quad E_{\mathbf{k}} \approx \int_{1/2}^{\infty} dr \frac{1}{r} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{ikr \cos \varphi} = \int_{1/2}^{\infty} dr \frac{1}{r} 2\pi J_0(kr) = 2\pi \int_{k/2}^{\infty} du \frac{J_0(u)}{u}$$

$$= 2\pi \left[\frac{k^2}{32} {}_2F_3 \left(1, 1; 2, 2, 2; -\frac{k^2}{16} \right) - \ln k - \gamma + 2 \ln 2 \right],$$

gdzie $J_n(z)$ jest funkcją Bessela pierwszego rodzaju, ${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q, z)$ jest uogólnioną funkcją hipergeometryczną, $\gamma \approx 0.577$ jest stałą Eulera-Mascheroniego² Gdy $k \ll 1$ pierwszy człon w (2.33) zanika, natomiast wiodącym członem jest $-\ln k$, który to właśnie odpowiedzialny jest za rozbieżność krawędzi pasma.

W układzie dwuwymiarowym dla $\mu = 2$ znajduję zatem zależność podobną do (2.25), $k \approx e^{-E_k}$. Separacja poziomów energetycznych,

$$(2.35) \quad \delta E = |\nabla_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \cdot \delta \mathbf{k}|,$$

gdzie dwuwymiarowy gradient po wektorze falowym dany jest przez

$$(2.36) \quad \nabla_{\mathbf{k}} = \hat{u}_k \frac{\partial}{\partial k} + \hat{u}_{\varphi} \frac{\partial}{k \partial \varphi},$$

gdzie $\hat{u}_i$ oznaczają ortogonalne wersory w biegunowym układzie współrzędnych oraz

$$(2.37) \quad \delta \mathbf{k} = \left(\frac{2\pi}{L}, \frac{2\pi}{L} \right).$$

Ostatecznie

$$(2.38) \quad \delta E = \frac{4\pi^2}{kL}.$$

Podobnie jak w części (A) tego podrozdziału wyprowadzam liczbę stanów o separacji energii większej od pewnego δE_0 . Liczba takich stanów wynosi

$$(2.39) \quad \frac{k}{\pi} = \frac{4\pi}{\delta E L}.$$

Liczba stanów o separacji większej niż $\sigma_{\text{eff}} = \sigma/L^{d/2}$ wynosi

$$(2.40) \quad \frac{k}{\pi} < \frac{4\pi}{\sigma},$$

natomiast względna liczba takich stanów,

$$(2.41) \quad \frac{k}{\pi} < \frac{4\pi}{\sigma L}$$

²Nie mylić ze stałą Eulera e . Stała gamma jest zdefiniowana jako granica,

$$(2.34) \quad \gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \ln n \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} (H_n - \ln n),$$

gdzie $H_n = \sum_{k=1}^n k^{-1}$ nazywany jest n -tą liczbą harmoniczną.

i maleje do zera w granicy termodynamicznej. Zatem w układzie dwuwymiarowym dla krytycznej wartości wykładnika $\mu = d = 2$, liczba niefizycznych stanów o nieskończonej energii dąży do zera w granicy termodynamicznej.

2.6. Równanie ruchu

Rozważania tego i trzech kolejnych podrozdziałów, tj. (2.7–2.9), zostały oryginalnie przedstawione w pracy Andersona [4] jednak jedynie dla układu 3D. Rozszerzam tutaj rozważania Andersona również dla układów niskowymiarowych.

W tym podrozdziale rozpoczynam rozważania nad ewolucją amplitud $c_\alpha(t)$ (zob. równanie (2.4)). Spełniają one równanie Schrödingera

$$(2.42) \quad i \dot{c}_\alpha(t) = \epsilon_\alpha c_\alpha(t) + \sum_{\beta \neq \alpha} V_{\alpha\beta} c_\beta(t).$$

Podejście zastosowane przez P. W. Andersona w [4] polega na rekurencyjnym rozwiązaniu równania (2.42) w dziedzinie zespolonego argumentu s przy zastosowaniu transformaty Laplace'a,

$$(2.43) \quad f_\alpha(s) = \int_0^\infty e^{-st} c_\alpha(t) dt.$$

Równanie (2.42) w dziedzinie transformat Laplace'a $f_\alpha(s)$ przyjmuje postać

$$(2.44) \quad i [s f_\alpha(s) - c_\alpha(0)] = \epsilon_\alpha f_\alpha(s) + \sum_{\alpha \neq \beta} V_{\alpha\beta} f_\beta(s),$$

gdzie $c_\alpha(0)$ oznacza początkową amplitudę α -tego stanu. Problem można sformułować następująco: jak będą ewoluowały $c_\alpha(t)$ lub $f_\alpha(s)$, gdy początkowo obsadzony będzie tylko jeden atom $\alpha_0 = 0$. Warunek początkowy zadany jest zatem przez $c_\alpha(0) = \delta_{\alpha 0}$.

Równanie (2.44) można rozwiązać rekurencyjnie [4]. W tym celu przekształca się je do postaci

$$(2.45) \quad f_\alpha(s) = \frac{i \delta_{\alpha 0}}{is - \epsilon_\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{is - \epsilon_\alpha} V_{\alpha\beta} f_\beta(s).$$

Teraz równanie (2.45) rozwija się rekurencyjnie względem $f_0(s)$. Dla $\alpha \neq 0$,

$$(2.46) \quad f_\alpha(s) = \frac{1}{is - \epsilon_\alpha} V_{\alpha 0} f_0(s) + \sum_{\beta \neq \alpha, 0} \frac{1}{is - \epsilon_\alpha} V_{\alpha\beta} f_\beta(s),$$

natomiast dla $\alpha = 0$,

$$(2.47) \quad f_0(s) = \frac{i}{is - \epsilon_0} + \sum_{\beta \neq 0} \frac{1}{is - \epsilon_0} V_{0\beta} f_\beta(s)$$

W dalszym ciągu rozwijając rekurencyjnie równania (2.46) oraz (2.47) otrzymuje się rozwiązanie dla $\alpha \neq 0$ w terminach $f_0(s)$,

$$(2.48) \quad f_\alpha(s) = \left(\frac{1}{is - \epsilon_0} V_{\alpha 0} + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{is - \epsilon_\alpha} V_{\alpha\beta} \frac{1}{is - \epsilon_\beta} V_{\beta 0} + \dots \right) f_0(s),$$

natomiast dla $\alpha = 0$,

$$(2.49) \quad f_0(s) = \frac{i}{is - \epsilon_0} + \frac{1}{is - \epsilon_0} \left(\sum_{\beta} \frac{V_{0\beta} V_{\beta 0}}{is - \epsilon_{\beta}} + \sum_{\gamma} V_{0\beta} \frac{1}{is - \epsilon_{\beta}} V_{\beta\gamma} \frac{1}{is - \epsilon_{\gamma}} V_{\gamma 0} + \dots \right) f_0(s).$$

Sumę w nawiasach w powyższym wyrażeniu oznaczam za [4] jako

$$(2.50) \quad \sum_{\beta} \frac{(V_{0\beta})^2}{is - \epsilon_{\beta}} + \sum_{\beta, \gamma} \frac{V_{0\beta} V_{\beta\gamma} V_{\gamma 0}}{(is - \epsilon_{\beta})(is - \epsilon_{\gamma})} + \dots = V_c(s).$$

Równanie (2.49) przyjmuje wówczas postać

$$(2.51) \quad f_0(s) = \frac{i}{is - \epsilon_0} + \frac{1}{is - \epsilon_0} V_c(s) f_0(s).$$

Interesować mnie będzie najpierw asymptotyczna wartość obsadzenia $\langle |c_0(\infty)|^2 \rangle$ mówiąca o tym jak bardzo rozplynął się początkowy stan po całym układzie. Nawiasy $\langle \dots \rangle$ oznaczają tu średnią po rozkładzie prawdopodobieństwa energii ϵ_{α} . W tym celu skorzystam z relacji prawdziwej dla transformaty Laplace'a,

$$(2.52) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} c_{\alpha}(t) = \lim_{s \rightarrow 0} s f_{\alpha}(s).$$

Zbadanie asymptotycznej wartości $V_c(0)$, a następnie $f_0(0)$ pozwoli znaleźć asymptotyczne obsadzenie zerowego atomu oraz określić, czy w danym układzie występuje transport. Czasami wystarczy ograniczyć się tylko do pierwszego członu w równaniu (2.50). Jest to przybliżenie pierwszego rzędu słuszne w reżimie silnego nieporządku (tj. dużej szerokości rozkładu ϵ_{α} względem $\max V_{\alpha\beta}$). Będę nazywał to przybliżenie *modelem centralnego atomu*. Pomija się przy tym wszystkie sprzężenia pomiędzy atomami poza sprzężeniem z początkowo obsadzonym atomem ($\alpha = 0$).

Separując część rzeczywistą i urojoną w (2.50) otrzymuje się

$$(2.53) \quad V_c(s) \approx \sum_{\beta} (V_{0\beta})^2 \left(\frac{-\epsilon_{\beta}}{s^2 + \epsilon_{\beta}^2} - \frac{is}{s^2 + \epsilon_{\beta}^2} \right).$$

W granicy $s \rightarrow 0$ pierwszy człon to druga poprawka do energii w rachunku zaburzeń, $-\Delta E^{(2)}$, natomiast drugi człon przyjmuje postać

$$-i \sum_{\beta} (V_{0\beta})^2 \delta(\epsilon_{\beta}) - is \sum_{\beta, \epsilon_{\beta} \neq 0} \frac{(V_{0\beta})^2}{\epsilon_{\beta}^2} = -\frac{i}{\tau} - isK,$$

co daje

$$(2.54) \quad \lim_{s \rightarrow 0} V_c(s) \approx -\Delta E^{(2)} - \frac{i}{\tau} - isK.$$

Korzystając z równań (2.51) oraz (2.54) otrzymuję rozwiązanie równania ruchu dla centralnego węzła (2.51),

$$(2.55) \quad f_0(s) = \frac{i}{is(1 + K) + i/\tau - (\epsilon_0 - \Delta E^{(2)})}.$$

W następnym podrozdziale znajduję asymptotyczne ($t \rightarrow \infty$) obsadzenie centralnego węzła.

2.7. Szczątkowe obsadzenie centralnego węzła

Odwrotna transformata dla $f_0(s)$ wyrażonego przez (2.55) jest równa

$$(2.56) \quad c_0(t) = \frac{1}{1-K} e^{-i(\epsilon_0 - \Delta E^{(2)})/(1-K)} e^{-t/\tau(1-K)}.$$

W przypadku gdy czas zaniku τ jest skończony, stan początkowy $c_0(t)$ będzie opróżniał się wykładniczo. Wówczas w układzie zachodzi transport, cząstka nie jest zlokalizowana. W przypadku nieskończonego τ w układzie nie zachodzi realny transport, pomimo że stan początkowy rozplywa się nieznacznie po pozostałych węzłach, a jego uśrednione po nieporządku asymptotyczne obsadzenie wynosi

$$(2.57) \quad \langle |c_0(\infty)|^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{(1+K)^2} \right\rangle,$$

gdzie K jest miarą rozplynięcia się stanu poprzez wirtualne przeskoiki. Wraz ze wzrostem nieporządku oczekiwane będzie dążenie τ do nieskończoności. Prawdopodobieństwo skończonego τ jest bowiem odwrotnie proporcjonalne do siły nieporządku. Przedstawię rozumowanie pokazujące, że dla $\mu > d$, obsadzenie stanu będzie niewiele mniejsze od jedności, tym bliższe, im wyższy nieporządek (skończone K , nieskończone τ). Szczególny przypadek stanowi $\mu = d$, w którym możliwa jest realna dyfuzja i (wolniejsze niż wykładnicze) opróżnianie się początkowo obsadzonego węzła. Możliwe jest także wyznaczenie czasu rozpadu.

W celu określenia dynamiki obsadzenia centralnego węzła znaję rozkład zmiennej losowej

$$(2.58) \quad \Im(V_c/s) \equiv X(s) = \sum_{\beta} \frac{(V_{0\beta})^2}{s^2 + \epsilon_{\beta}^2}.$$

Korzystając z (2.58) oraz (2.54) otrzymuje się

$$(2.59) \quad sX(s) = 1/\tau + sK, \quad \text{dla } s \rightarrow 0.$$

Skończone $X(0)$ oznacza skończone $K = X(0)$ i nieskończone τ , a więc brak realnego transportu w układzie. Aby zatem w układzie zachodził transport potrzebne jest nieskończone $X(0)$. Możliwe jest wtedy wyznaczenie czasu rozpadu, gdyż

$$(2.60) \quad X(s) = \frac{1}{s\tau} \stackrel{s=1/\tau}{=} 1.$$

Oznacza to, że wartość s , dla której $X(s)$ jest rzędu jedności, można traktować jako odwrotność czasu rozpadu.

2.8. Metoda Markova-Holtmarka wyznaczania rozkładu prawdopodobieństwa

Funkcję gęstości rozkładu zmiennej losowej $X(s)$ podał P. W. Anderson w [4]. Nie została ona tam jednak wyprowadzona. Dodatkowo znaleziony przez Andersona rozkład dotyczy jedynie układu trójwymiarowego i w ogóle nie jest dobrze zdefiniowanym rozkładem, gdyż całka z funkcji gęstości nie jest unormowana do jedności. Pomimo jakościowej poprawności, nie posiada zatem poprawności ilościowej. Dlatego korzystając z komentarza poczynionego przez Andersona, w jaki sposób obliczył rozkład zmiennej $X(s)$, zapoznałem się z literaturą, by samodzielnie wyprowadzić rozkład $X(s)$ dla dowolnej wymiarowości układu oraz poprawić nieścisłości obecne w oryginalnym artykule Andersona [4].

Rozkład $X(s)$ znajduję metodą Markowa [28, 35], korzystając z modyfikacji Holtsmarka [36]. Metoda ta służy do znajdowania funkcji gęstości rozkładu prawdopodobieństwa wieloelementowej sumy zmiennych losowych. Najpierw, formułuję problem w bardziej ogólnej postaci. Niech

$$(2.61) \quad X = \sum_{\beta} X_{\beta}(\epsilon_{\beta}, r_{\beta}),$$

gdzie każdy ze składników sumy $X_{\beta}(\epsilon_{\beta}, r_{\beta})$ jest funkcją zmiennej losowej ϵ_{β} oraz odległości r_{β} od centralnego węzła ($\alpha = 0$). Nie zakładam tu *a priori* nic na temat wymiarowości układu. Chcę znaleźć prawdopodobieństwo tego, że

$$(2.62) \quad X \text{ leży pomiędzy } X - \frac{1}{2}dX \text{ a } X + \frac{1}{2}dX.$$

Niech σ_{β} oznacza wspólny rozkład prawdopodobieństwa zmiennych ϵ_{β} oraz r_{β} (w ogólności atomy mogą mieć losowe położenia). Prawdopodobieństwo $\mathcal{W}(X)$, że spełniony jest warunek (2.62), dane jest całką

$$(2.63) \quad \mathcal{W}(X) = \frac{1}{\mathcal{V}^N} \int \dots \int \sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1} d\epsilon_0 d\mathbf{r}_0 d\epsilon_1 d\mathbf{r}_1 \dots d\epsilon_{N-1} d\mathbf{r}_{N-1},$$

gdzie całkowanie przebiega po obszarze zdefiniowanym w (2.62), $\mathcal{V}$ jest objętością układu, natomiast $\mathcal{V}^N$ pełni rolę czynnika normującego dla rozkładu położeń. N -ta potęga wynika z N -krotnego całkowania po objętości w (2.63). Normowanie rozkładu ϵ_{β} nie jest konieczne, gdyż dobrze określony rozkład jest zawsze unormowany do jedności. Aby scałkować (2.63) rozszerzę granice całkowania do całego przebiegu zmienności zmiennych ϵ_{β} oraz r_{β} . W tym celu wprowadzam funkcję Dirichleta

$$(2.64) \quad H(\alpha, \delta) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\alpha\xi)}{\xi} e^{i\delta\xi} d\xi = \begin{cases} 1 & \alpha < \delta < \alpha, \\ 0 & \text{w pozostałych przypadkach,} \end{cases}$$

gdzie przyjmuję

$$(2.65) \quad \alpha = \frac{1}{2}dX \quad \text{oraz} \quad \delta = \sum_{\beta} X_{\beta}(\epsilon_{\beta}, r_{\beta}) - X.$$

co oddaje warunek (2.62). Jako że α jest małe, można przybliżyć $\sin(\alpha x)/x \approx \alpha$. Wtedy

$$(2.66) \quad H(\alpha, \delta) = \frac{dX}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ix \left(\sum_{\beta} X_{\beta} - X \right) \right] dx.$$

Całkując (2.63) z funkcją Dirichleta $H(\alpha, \delta)$, można rozciągnąć granice całkowania od $-\infty$ do ∞ ,

$$\begin{aligned}
 \mathcal{W}(X)dX &= \frac{dX}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ixX} \\
 (2.67) \quad &\times \frac{1}{\mathcal{V}^N} \int \dots \int \sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1} e^{ix \sum_{\beta} X_{\beta}} d\epsilon_0 d\mathbf{r}_0 d\epsilon_1 d\mathbf{r}_1 \dots d\epsilon_{N-1} d\mathbf{r}_{N-1} \\
 &= \frac{dX}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ixX} \varphi(x),
 \end{aligned}$$

gdzie

$$(2.68) \quad \varphi(x) = \frac{1}{\mathcal{V}^N} \int \dots \int \sigma_0 \sigma_1 \dots \sigma_{N-1} e^{ix \sum_{\beta} X_{\beta}} d\epsilon_0 d\mathbf{r}_0 d\epsilon_1 d\mathbf{r}_1 \dots d\epsilon_{N-1} d\mathbf{r}_{N-1}$$

jest funkcją charakterystyczną rozkładu $\mathcal{W}(X)$. Rozkład $\mathcal{W}(X)$ jest transformatą Fouriera funkcji charakterystycznej $\varphi(x)$. Jeśli przyjmiemy, że rozkłady σ_{β} są takie same, tj. niezależne od β^3 oraz przekształci się funkcję wykładniczą sumy w eksponencje na iloczyn funkcji wykładniczych, otrzyma się

$$(2.69) \quad \varphi(x) = \left[\frac{1}{\mathcal{V}} \int d\epsilon \int d\mathbf{r} e^{ix \tilde{X}(\epsilon, r)} \sigma(\epsilon, r) \right]^N,$$

gdzie $\tilde{X}(\epsilon, r) = V^2(r)/(s^2 + \epsilon^2)$ oraz $V(r) = 1/r^{\mu}$ jest uciętą postacią sprzężenia pomiędzy węzłami odległymi o r . Zakładając regularny rozkład położenia atomów $\sigma(\epsilon, r) = \sigma(\epsilon)$ oraz przechodząc do granicy termodynamicznej

$$(2.70) \quad N \rightarrow \infty, \quad \mathcal{V} \rightarrow \infty, \quad n = \frac{N}{V} \rightarrow \text{const.}$$

otrzymujemy

$$(2.71) \quad \varphi(x) = \exp(-nC(x)),$$

gdzie

$$(2.72) \quad C(x) = \left\langle \int \left[1 - \exp\left(ix \frac{V^2(r)}{s^2 + \epsilon^2} \right) \right] d\mathbf{r} \right\rangle$$

oraz $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią po rozkładzie energii ϵ , tj. całkę z funkcją gęstości tego rozkładu. Obliczam $C(x)$ w d -wymiarowych współrzędnych biegunowych oraz dla pewnego rozkładu prawdopodobieństwa energii o funkcji gęstości $P(\epsilon)$,

$$(2.73) \quad C(x) = \int_{-\infty}^{\infty} P(\epsilon) d\epsilon d\zeta_d \int_0^{\infty} r^{d-1} \left[1 - \exp\left(ix \frac{V^2(r)}{s^2 + \epsilon^2} \right) \right] dr.$$

³Jest to prawdą dla niezależnych zmiennych losowych ϵ_{β} , które pochodzą z tego samego rozkładu prawdopodobieństwa, podobnie dla losowych r_{β} jak też i dla zadanych przez określoną sieć atomową.

$N = n\zeta_d r^d$ jest liczbą węzłów mieszczących się wewnątrz d -wymiarowej kuli o promieniu r . Parametr geometryczny ζ_d zależy od wymiarowości układu d i wynosi odpowiednio

$$(2.74) \quad \zeta_1 = 2, \quad \zeta_2 = \pi, \quad \zeta_3 = \frac{4}{3}\pi.$$

Rozważać będę najpierw przypadek $s = 0$, odpowiadający asymptotycznym wartościom w dziedzinie czasowej ($t \rightarrow \infty$). Zachowanie się $\mathcal{W}(X)$ dla dużego X odpowiada zachowaniu się $C(x)$ dla niewielkich x . W silnie niejednorodnym układzie, $\langle \epsilon \rangle \gg 1$, funkcję wykładniczą $\exp(ixV^2/\epsilon^2)$ można rozwinąć w szereg i dokonać całkowania po r (pod warunkiem, że $V(r)$ maleje szybciej niż $r^{-d/2}$). Całka ma wtedy człony rzędu $\mathcal{O}(x)$, które są małe. Istotne jest zatem znalezienie całki jedynie dla małych ϵ . Dla jednorodnego rozkładu energii ϵ na przedziale $[-W/2, W/2]$,

$$(2.75) \quad \begin{aligned} C(x) &= \frac{\zeta_d}{W} \int_0^\infty r^{d-1} dr \int_{-\infty}^\infty d\epsilon \left\{ 1 - \exp \left[\frac{xV^2(r)}{\epsilon^2} \right] \right\} \\ &= \frac{\zeta_d}{W} \sqrt{x} \int_0^\infty V(r) r^{d-1} dr \int_{-\infty}^\infty du [1 - \exp(i/u^2)] \\ &= 2\sqrt{\frac{\pi x}{i}} \frac{\langle V \rangle}{W}, \end{aligned}$$

gdzie dokonałem podstawienia $u^2 = \epsilon^2/xV^2$, natomiast $\langle V \rangle = \int d\zeta_d V(r) r^{d-1} dr$ jest średnią (po objętości) z oddziaływania. Warunkiem całkowalności po zmiennej r (w granicy termodynamicznej) jest, aby $V(r)$ malało szybciej niż r^{-d} ($\mu > d$). Na koniec wykonuję transformatę Fouriera (2.67) i znajduję rozkład,

$$(2.76) \quad \begin{aligned} \mathcal{W}(X) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \exp[-ixX] \exp \left[-2n\sqrt{\frac{\pi x}{i}} \frac{\langle V \rangle}{W} \right] dx \\ &= \frac{n\langle V \rangle}{W X^{3/2}} \exp \left[-\pi \left(\frac{n\langle V \rangle}{W} \right)^2 \frac{1}{X} \right]. \end{aligned}$$

Powyższy wzór jest funkcją gęstości rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej losowej K występującym we wzorze (2.57) i został podany oryginalnie przez Andersona w [4]. Pozwoliłem sobie poprowadzić rozumowanie Andersona dalej i obliczyć ilościowe rozplynięcie się obsadzenia centralnego węzła. Korzystając z (2.57) otrzymuję

$$(2.77) \quad \begin{aligned} \langle |c_0(\infty)|^2 \rangle &= 1 - \frac{3}{2}\pi \exp(\pi p^2) \operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}p) p \\ &\quad + \pi p^2 \\ &\quad - \pi^2 \exp(\pi p^2) \operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}p) p^3 \end{aligned}$$

gdzie $p = n\langle V \rangle/W$. W reżimie dużego nieporządku możemy się ograniczyć do członów liniowych w p oraz przyjąć $\exp(\pi p^2) \operatorname{erfc}(\sqrt{\pi}p) \approx 1$. Wtedy

$$(2.78) \quad \langle |c_0(\infty)|^2 \rangle \approx 1 - \frac{3}{2} \frac{\pi n \langle V \rangle}{W}$$

jest obsadzeniem centralnego węzła spowodowanym przez wirtualne przeskokki do pozostałych węzłów sieci. Wzór ten jest słuszny jedynie w reżimie silnego nieporządku $\langle V \rangle / W \ll 1$. Szczątkowe obsadzenie początkowo pobudzonego węzła jest tylko nieznacznie odchyłone od jedności. W dalszej części rozprawy znajduję czasową ewolucję pozostałych węzłów.

2.9. Szczególny przypadek $\mu = d$

Otrzymana w poprzednim podrozdziale gęstość $\mathcal{W}(X)$ wrażona wzorem (2.76) nie jest słuszna w przypadku $\mu = d$. Całka po objętości w (2.73) dla $s = 0$ staje się rozbieżna. Aby zatem rozważyć szczególny przypadek $\mu = d$ należy pozostawić $s \neq 0$. Wówczas, możliwym staje się całkowanie po objętości w (2.73) podstawiając za $V(r) = A/r^{d4}$. Tym razem całkuję najpierw po objętości, a następnie po rozkładzie prawdopodobieństwa energii,

$$(2.79) \quad \begin{aligned} C(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} P(\epsilon) d\epsilon \zeta_d \int_0^{\infty} d[r^d] \left\{ 1 - \exp \left[\frac{ixA^2}{r^{2d}(s^2 + \epsilon^2)} \right] \right\} \\ &= \zeta_d A \sqrt{\frac{\pi x}{i}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(\epsilon)}{\sqrt{\epsilon^2 + s^2}} d\epsilon = \frac{2\zeta_d A}{W} \sqrt{\frac{\pi x}{i}} \sinh^{-1} \left(\frac{W}{2s} \right), \end{aligned}$$

gdzie przy całkowaniu po energiach ponownie założyłem symetryczny jednostajny rozkład energii o szerokości W [$\epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$]. Ponownie wykonując transformatę Fouriera (2.67) otrzymuję

$$(2.80) \quad \mathcal{W}(X) = \frac{n\zeta_d A \sinh^{-1} \left(\frac{W}{2s} \right)}{W X^{3/2}} \exp \left[-\pi \left(\frac{n\zeta_d A \sinh^{-1} \left(\frac{W}{2s} \right)}{W} \right)^2 \frac{1}{X} \right].$$

Wartość najbardziej prawdopodobna (modalna) wynosi

$$(2.81) \quad [X(s)]_{\text{M.P.}} = \frac{2\pi}{3} \left[\frac{n\zeta_d A \sinh^{-1} \left(\frac{W}{2s} \right)}{W} \right]^2 \approx \frac{2\pi}{3} \left[\frac{n\zeta_d A \ln \left(\frac{W}{s} \right)}{W} \right]^2,$$

gdzie dokonano przybliżenia $\sinh^{-1}(x) \approx \ln(2x)$ dla $x \rightarrow \infty$. Gdy $s \rightarrow 0$ wartość modalna rozkładu $\mathcal{W}(X)$ rozbiega się (jak $\ln^2 s$) do nieskończoności. W takim przypadku korzystając z równania (2.60) można oszacować średni czas rozpadu,

$$(2.82) \quad \tau \simeq \frac{1}{W} \exp \left(\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \frac{W}{n\zeta_d A} \right).$$

Czas rozpadu rośnie z siłą nieporządku W i maleje z gęstością węzłów n . W tym miejscu warto zwrócić uwagę, że jedynym istotnym parametrem modelu jest W/n . Dla ustalonej stałej sieciowej jedynym parametrem modelu jest siła nieporządku.

⁴Przyjmując J w hamiltonianie (2.3) jako całkowitą skalę energii, stała $A = 1$.

2.10. Przybliżone rozwiązanie analityczne wykorzystujące model centralnego atomu

W tym podrozdziale prezentuję przybliżone podejście analityczne do rozważanego problemu, które jest dostępne przy użyciu modelu centralnego atomu w reżimie silnego nieporządku. Znajduję nieuśrednione obsadzenie poszczególnych węzłów w funkcji czasu. Uśrednianie wyników po określonym rozkładzie energii $\{\epsilon_\alpha\}$ zostanie przedstawione w podrozdziale 2.12. Wynik zależny jest nieznacznie od przyjętego rozkładu, natomiast wyprowadzony tutaj wzór pozwoli wyznaczyć obsadzenia dla dowolnego dobrze określonego rozkładu energii ϵ_α . Dodatkowo w następnym podrozdziale pokażę, że otrzymany tu wynik można otrzymać w modelu jeszcze bardziej uproszczonym, tj. rozważając układ jedynie dwóch atomów, pierwszego, który zostaje początkowo obsadzony i drugiego, do którego odbywa się dyfuzja na zadaną odległość r . Wyniki prezentowane w tym oraz w dwóch następnych podrozdziałach są oryginalne i zostały opublikowane częściowo w [5] a częściowo w [23], z czego podejście zastosowane w tym podrozdziale opublikowano w [5].

W modelu centralnego atomu pozostaje tylko pierwszy człon w równaniu (2.48), natomiast w równaniu (2.49) pozostaje jedynie pierwszy człon i pierwsza suma. Otrzymuje się zatem rozwiązanie

$$(2.83) \quad f_\alpha(s) = \frac{iV_{\alpha 0} \prod_{\beta \neq 0, \beta \neq \alpha} (is - \epsilon_\beta)}{\prod_\beta (is - \epsilon_\beta) - \sum_{\beta \neq 0} \prod_{\gamma \neq \beta, \gamma \neq 0} V_{0\beta} V_{\beta 0} (is - \epsilon_\gamma)}.$$

Używając wzoru Mellin'a na odwrotną transformatę Laplace'a,

$$(2.84) \quad c_\alpha(t) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{\gamma-iT}^{\gamma+iT} e^{st} f_\alpha(s) ds,$$

znajduję rozwiązanie w dziedzinie czasowej, całkując z wykorzystaniem twierdzenia o residuach i otrzymując

$$(2.85) \quad c_\alpha(t) = \sum_n b_n^{(\alpha)} e^{-iz_n t},$$

gdzie $z_n = is_n$ oraz s_n są biegunami funkcji analitycznej zadanej wzorem (2.83). Wszystkie z_n muszą być rzeczywiste. Dodatkowo

$$(2.86) \quad b_n^{(\alpha)} = 2\pi i \text{Res}_{z_n} f_\alpha(z) = \frac{V_{\alpha 0} \prod_{\beta \neq 0, \beta \neq \alpha} (z_n - \epsilon_\beta)}{\prod_{\beta \neq n} (z_n - z_\beta)},$$

gdzie $\text{Res}_{z_n} f_\alpha(z)$ oznacza residuum $f_\alpha(z)$ w punkcie z_n . Jak długo sprzężenie jest małe w porównaniu z siłą nieporządku, pierwiastki mianownika (energje własne) we wzorze (2.83) leżą blisko energii ϵ_α w porównaniu z typową odległością pomiędzy tymi pierwiastkami. Dlatego można powiązać każdy biegun z najbliższą mu energią ϵ_α , wyrównać numerowanie energii

własnych i założyć, że $\frac{z_n - \epsilon_\beta}{z_n - z_\beta} \approx 1$, gdy $n \neq \beta$. Używając tego przybliżenia otrzymujemy

$$b_n^{(\alpha)} \approx \begin{cases} \frac{V_{\alpha 0}}{z_0 - z_\alpha}, & n = 0, n \neq \alpha, \\ \frac{V_{\alpha 0}}{z_n - z_0}, & n = \alpha \neq 0, \\ 0, & \text{w pozostałych przypadkach.} \end{cases}$$

Zatem amplituda $c_\alpha(t)$ przyjmuje postać

$$\begin{aligned} c_\alpha(t) &= b_0^{(\alpha)} e^{-iz_0 t} + b_\alpha^{(\alpha)} e^{-iz_\alpha t} \\ &= e^{-iz_0 t} \frac{V_{\alpha 0}}{z_0 - z_\alpha} \left(1 - e^{-i(z_0 - z_\alpha)t} \right), \end{aligned}$$

co daje obsadzenie węzła o numerze α postaci

$$(2.87) \quad |c_\alpha(t)|^2 = |V_{\alpha 0}|^2 \frac{\sin^2(\delta z_\alpha t/2)}{(\delta z_\alpha/2)^2},$$

gdzie $\delta z_\alpha = z_0 - z_\alpha$ jest odległością poziomów energetycznych pomiędzy atomem na zadanym węzle α a początkowo obsadzonym atomem. Dla dużych δz_α , bieguny są tylko nieznacznie przesunięte względem początkowych energii, dlatego gęstość rozkładu prawdopodobieństwa jest bliska rozkładowi separacji diagonalnych energii $f_\infty(\delta\epsilon)$ (tutaj ∞ odnosi się do nieskończonej odległości pomiędzy węzłami, skąd bierze się zerowe sprzężenie). Rozkład gęstości prawdopodobieństwa $f_\infty(u)$ jest rozkładem różnicy dwóch zmiennych losowych pochodzących z tego samego rozkładu. Zakładając jednostajny rozkład energii $\epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$,

$$(2.88) \quad f_\infty(u) = \frac{W - |u|}{W^2}, \quad u \in [-W, W],$$

jest funkcją trójkątną o wysokości $1/W$ i szerokości $2W$. W przypadku gdy $\epsilon_\alpha \in \mathcal{N}(0, \sigma)$, rozkład $f_\infty(u)$ również jest rozkładem normalnym, z tym że z odchyleniem standardowym $\sqrt{2}\sigma$,

$$(2.89) \quad f_\infty(u) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sigma} e^{-u^2/4\sigma^2}.$$

Natomiast dla $\delta z_\alpha \sim V_{\alpha 0}$ gęstość zmiennej losowej musi odzwierciedlać odpychanie się poziomów energetycznych. Postać gęstości rozkładu można znaleźć przez zauważenie, że para węzłów odległych o r o separacji energii $\delta\epsilon > 0$ oraz połączonych przez sprzężenie o sile V_r daje wkład do dwóch biegunów odseparowanych o $\delta z = \sqrt{(\delta\epsilon)^2 + 4V_r^2}$. Stąd, można otrzymać dystrybuantę

$$(2.90) \quad P(0 < \delta z < u) = \int_0^{\sqrt{u^2 - 4V_r^2}} f_\infty(x) dx, \quad |u| > 2V_r$$

oraz odpowiadający jej rozkład gęstości prawdopodobieństwa,

$$(2.91) \quad f_r(u) = \begin{cases} f_\infty(\sqrt{u^2 - 4V_r^2}) \frac{|u|}{\sqrt{u^2 - 4V_r^2}}, & |u| > 2V_r, \\ 0, & |u| \leq 2V_r, \end{cases}$$

gdzie V_r odpowiada sprzężeniu z atomem odległym o r od atomu zerowego. Powyższy rozkład odpowiada rozkładowi $f_\infty(u)$, ale mającemu przerwę wokół zera o szerokości $4V_r$ i rozbieżnemu w $u = \pm 2V_r$. Obsadzenie węzła odległego o r od centrum ma zatem postać

$$(2.92) \quad |c_r(t)|^2 = V_r^2 \int_{-\infty}^{\infty} du f_r(u) \frac{\sin^2(ut/2)}{(u/2)^2}$$

i jest równe dla wszystkich węzłów odległych o r niezależnie od wymiarowości układu. W podrozdziale 2.12 wykonam powyższą całkę dla rozkładu jednostajnego oraz normalnego energii znajdując ewolucję obsadzeń.

2.11. Model dwóch atomów

W tym podrozdziale pokazuję, że wzór (2.92) można otrzymać w bardziej bezpośredni sposób, rozważając układ złożony jedynie z dwóch atomów (model dwóch atomów). Wyniki tego podrozdziału zostały opublikowane w [23].

Skoro w silnie niejednorodnym układzie istotne są jedynie przeskoki pierwszego rzędu, na dany przeskok nie powinny mieć wpływu pozostałe atomy. Rozważam zatem układ dwóch atomów odległych o r . Jeden z nich jest początkowo obsadzony, natomiast drugi jest pusty. Hamiltonian odpowiadający temu układowi ma postać

$$(2.93) \quad H = \left(\epsilon_0 + \frac{1}{2}\delta\epsilon \right) \mathbb{I} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\delta\epsilon & 2V_r \\ 2V_r & \delta\epsilon \end{pmatrix},$$

gdzie energie na węzłach wynoszą odpowiednio ϵ_0 oraz $\epsilon_r = \epsilon_0 + \delta\epsilon$, $\mathbb{I}$ jest macierzą jednostkową o wymiarze 2×2 , natomiast $V_r = 1/r^\mu$, podobnie jak w poprzednim podrozdziale, jest oddziaływaniem ze spinem odległym o r . Hamiltonian daje się zdiagnozować analitycznie w prosty sposób. Wartości własne $E_\pm$ oraz wektory własne $|\pm\rangle$ dane są wzorami

$$(2.94) \quad E_\pm = \epsilon_0 + \frac{1}{2}\delta\epsilon \pm \frac{1}{2}\Omega,$$

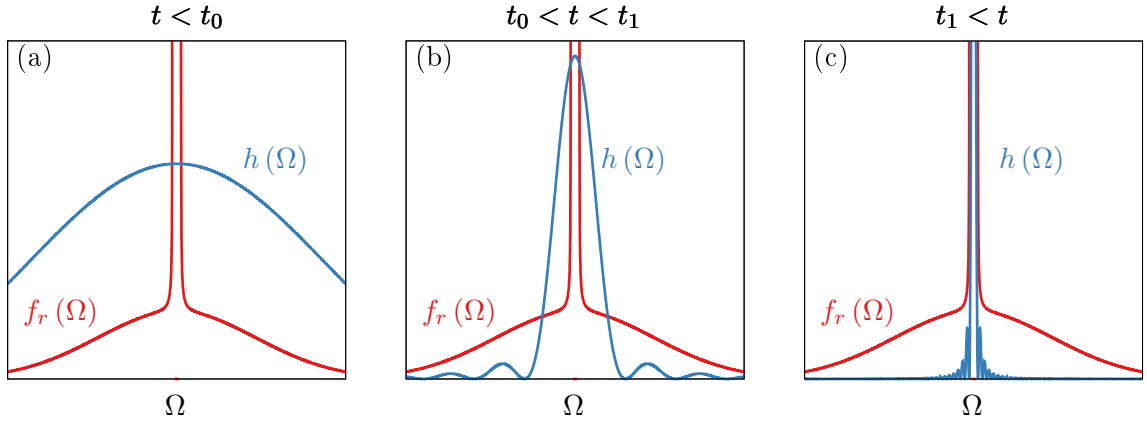
$$(2.95) \quad |+\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) \end{pmatrix},$$

gdzie

$$(2.96) \quad \Omega = \sqrt{(\delta\epsilon)^2 + 4V_r^2}, \quad \delta\epsilon = \Omega \cos \theta \quad \text{oraz} \quad 2V_r = \Omega \sin \theta.$$

Czasowa ewolucja amplitudy prawdopodobieństwa dla odległego spinu dana jest wzorem

$$(2.97) \quad c_r(t) = \langle r | \Psi(t) \rangle = \langle r | e^{-iHt} | 0 \rangle = \sum_{n=\pm} \langle r | n \rangle \langle n | 0 \rangle e^{-iE_n t}.$$



Rys. 2.2. Schematyczny rysunek funkcji gęstości prawdopodobieństwa f_r dla rozkładu normalnego energii (taka sama czerwona linia na wszystkich wykresach) oraz funkcja $h(u)$ (niebieska linia) odpowiadająca trzem fazom propagacji: (a) kwadratowej w czasie, (b) liniowej w czasie i (c) wysycenia. Źródło: adaptacja rysunku z pracy [5].

Łącząc równania (2.94–2.97) otrzymuje się wzór (2.87)

$$(2.87') \quad |c_r(t)|^2 = 4V_r^2 \frac{\sin^2(\Omega t/2)}{(\Omega/2)^2}.$$

Średnią po realizacjach nieporządku liczy się poprzez wycałkowanie z funkcją $f_\infty(\delta\epsilon)$, czyli gęstością rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej losowej $\delta\epsilon$,

$$(2.98) \quad \langle |c_r(t)| \rangle = V_\alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} d(\delta\epsilon) f_\infty(\delta\epsilon) \frac{\sin^2[\Omega(\delta\epsilon)t/2]}{[\Omega(\delta\epsilon)/2]^2}.$$

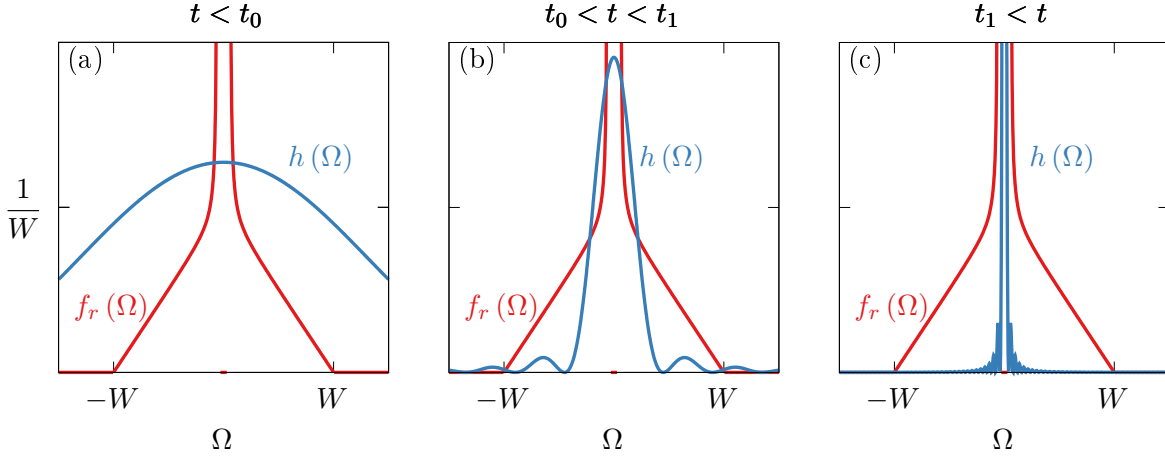
Teraz, dokonując zmiany zmiennej całkowania z $\delta\epsilon$ na Ω (zob. równanie (2.96)) otrzymuje się równanie (2.92),

$$(2.92') \quad \langle |c_r(t)|^2 \rangle = V_\alpha^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega f_r(\Omega) \frac{\sin^2(\Omega t/2)}{(\Omega/2)^2},$$

gdzie

$$(2.99) \quad f_r(\Omega) = f_\infty \left(\sqrt{\Omega^2 - 4V_r^2} \right) \frac{|\Omega|}{\sqrt{\Omega^2 - 4V_r^2}}$$

można traktować jak funkcję gęstości rozkładu prawdopodobieństwa zmiennej Ω dla spinów odległych o r od centrum (por. równanie (2.91)). W reżimie silnego nieporządku i/lub dużych odległości r , funkcja $f_r(\Omega)$ dąży do $f_\infty(\delta\epsilon)$. Otrzymany tutaj wzór na obsadzenie węzłów jest tożsamy z wynikiem poprzedniego podrozdziału. W następnym rozdziale obliczam całkę po rozkładzie energii, znajdując ewolucję obsadzeń.



Rys. 2.3. Schematyczny rysunek funkcji gęstości prawdopodobieństwa f_r dla jednorodnego rozkładu energii (taka sama czerwona linia na wszystkich wykresach) oraz funkcja $h(\Omega)$ (niebieska linia) odpowiadająca trzem fazom propagacji: (a) kwadratowej w czasie, (b) liniowej w czasie i (c) wysycenia. Źródło: adaptacja rysunku z pracy [23].

2.12. Trójfazowa ewolucja obsadzeń

W tym podrozdziale znajduję ewolucję czasową obsadzenia na danym węźle. Wyniki zaprezentowane tutaj są kompilacją wyników opublikowanych przeze mnie w [5, 23]. Pokazuje, że wzrost obsadzeń następuje w trzech następujących po sobie fazach. Najpierw obsadzenie rośnie z kwadratem czasu. Następnie, w określonej chwili czasu, następuje przejście do zależności liniowej w czasie. Ostatecznie następuje wysycenie (saturacja). Dynamikę obsadzeń znajduje się, licząc całkę (2.92). Dla otrzymania konkretnego wyniku konieczne będzie tutaj przyjęcie pewnego rozkładu prawdopodobieństwa energii. Najpierw staram się zachować ogólną postać wyników, tj. niezależną od konkretnej funkcji gęstości. Na koniec podstawiam do ogólnych wzorów konkretne postaci funkcji gęstości rozkładu.

Dla bardzo krótkich czasów funkcja $h(u) = \sin^2(ut/2)/(u/2)^2$ występująca w (2.92) może być przybliżona przez $h(u) \approx t^2$ (pierwszy rząd rozwinięcia w szereg Taylora; zob. Rys. 2.2(a) lub 2.3(a)). Całka po rozkładzie prawdopodobieństwa równa jest jedności i otrzymuje się

$$(2.100) \quad \langle |c_r(t)|^2 \rangle = \frac{t^2}{r^{2\mu}} \quad \text{dla } t < t_0.$$

Kwadratowy wzrost obsadzenia w czasie nie zależy od występowania nieporządku w układzie i stanowi fundamentalną własność układów ze sprzężeniem $\propto 1/r^\mu$, którą można otrzymać z krótkoczasowego rachunku zaburzeń (zob. np. [37]).

Następnie, dla średnich czasów, $t_0 < t < t_1$, funkcja $h(u)$ zwęża się dążąc do nieunormowanej delty Diraca o polu powierzchni $2\pi t$, ale jest wciąż na tyle szeroka, że przerwa w środku rozkładu $f_r(u)$ jej nie obejmuje (zob. Rys. 2.3(b) lub Rys. 2.2(b)). Dokładniej mówiąc szerokość $h(u)$ maleje jak $1/t$. Czas potrzebny, aby wierzchołek $h(u)$ znalazł się wewnątrz szczeliny jest proporcjonalny do $1/V_r$ (szerokości szczeliny). Z kolei szerokość rozkładu $f_r(u)$ jest duża. Zatem $h(u)$ pokrywa wąski obszar wokół jeszcze węższej luki $f_r(u)$ przy wierzchołku funkcji rozkładu

$f_\infty(0)$. Całka po zmiennej u jest w przybliżeniu równa powierzchni pod $h(u)$ pomnożonego przez wysokość wierzchołka $f_\infty(0)$ równanie (2.92) przyjmuje postać

$$(2.101) \quad \langle |c_r(t)|^2 \rangle = V_r^2 \int_{-\infty}^{\infty} f_\infty(u) 2\pi t \delta(u) = \frac{2\pi f_\infty(0)}{r^{2\mu}} t \quad \text{dla} \quad t_0 < t < t_1.$$

Ponieważ obsadzenie jest ciągłą funkcją czasu, można znaleźć czas przejścia pomiędzy pierwszą a drugą fazą ruchu,

$$(2.102) \quad t_0 = 2\pi f_\infty(0).$$

Jest on taki sam dla wszystkich węzłów (tj. niezależny od odległości węzła od centrum).

Ostatecznie, gdy funkcja $h(u)$ staje się na tyle wąska, jej wierzchołek wchodzi w obszar przerwy znajdującej się w środku rozkładu $f_r(u)$ (zob. Rys. 2.3(c) lub Rys. 2.3(c)). Szybko-zmienny, oscylujący charakter licznika w $h(u)$ można wtedy uśrednić ($\overline{\sin^2(x)} = 1/2$) i przyjąć $h(\Omega) \approx (1/2) \cdot (\Omega/2)^{-2}$, co daje

$$(2.103) \quad \begin{aligned} \langle |c_r(t)|^2 \rangle &= 2V_r^2 \int_{2V_r}^{\infty} f_r(u) \frac{1/2}{(u/2)^2} du \\ &= 2V_r^2 \int_{2V_r}^{\infty} f_\infty \left(\sqrt{u^2 - 4V_r^2} \right) \frac{u}{\sqrt{u^2 - 4V_r^2}} \frac{1/2}{(u/2)^2} du. \end{aligned}$$

Jakkolwiek możliwe jest obliczenie powyższej całki dokładnie dla zadanego rozkładu, umieszczam je w Dodatku B. Teraz ograniczam się do podania rozwiązania przybliżonego. Po zamianie zmiennych $x^2 = u^2 - 4V_r^2$ otrzymuje się

$$(2.104) \quad \langle |c_r(t)|^2 \rangle = 4V_r^2 \int_0^{\infty} \frac{f_\infty(x) dx}{x^2 + 4V_r^2}.$$

Skoro rozkład $f_\infty(x)$ jest szeroki można przybliżyć go jego wartością w $x = 0$. Otrzymuje się wtedy

$$(2.105) \quad \langle |c_r(t)|^2 \rangle = 2V_r f_\infty(0) \arctg \left(\frac{x}{2V_r} \right) \Big|_{x=x_0 \rightarrow \infty} \approx 2V_r f_\infty(0) \frac{\pi}{2}.$$

W szczególnych przypadkach rozkład $f_\infty(x)$ może być obcięty od pewnego $x = x_0$ (np. rozkład jednostajny), jednak górna granica całkowania będzie zawsze rzędu odchylenia standardowego, które w reżimie silnego nieporządku jest zawsze dużo większe od V_r , zatem przybliżenie w równaniu (2.105) jest słuszne. Kolejny raz, żądając ciągłości obsadzenia w czasie, dostaje się drugi czas przejścia,

$$(2.106) \quad t_1 = \frac{r^\mu}{2}.$$

Powyższe wyprowadzenia wykazały potrójną dynamikę korelacji. W zależności od tego, jak rozdystrybuowane są energie na węzle, dynamiki będą się różnić, różnica ta jednak jest tylko ilościowa, nie zaś jakościowa. Rozwiązania dla dwóch wybranych rozkładów energii (jednostajnego i normalnego) podane są w Tabeli 2.1. Wzory (2.100), (2.101) oraz (2.105)) są

jednak poprawne dla dowolnie dobrze określonego symetrycznego rozkładu o dużym odchyleniu standardowym.

	$\epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$	$\epsilon \in \mathcal{N}(0, \sigma)$
I faza	$\frac{t^2}{r^{2\mu}}$	$\frac{t^2}{r^{2\mu}}$
t_0	$\frac{2\pi}{W}$	$\frac{\sqrt{\pi}}{\sigma}$
II faza	$\frac{2\pi t}{Wr^{2\mu}}$	$\frac{\sqrt{\pi}t}{\sigma r^{2\mu}}$
t_1	$\frac{r^\mu}{2}$	$\frac{r^\mu}{2}$
III faza	$\frac{\pi}{Wr^\mu}$	$\frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma r^\mu}$

Tablica 2.1. Obsadzenie $\langle |c_r|^2 \rangle$ w każdej z faz ruchu oraz czasy przejścia t_0, t_1 pomiędzy fazami dla dwóch rozkładów prawdopodobieństwa energii na węźle, symetrycznego jednorodnego rozkładu $\mathcal{U}(-W/2, W/2)$ o szerokości W oraz symetrycznego rozkładu normalnego $\mathcal{N}(0, \sigma)$ o odchyleniu standardowym σ .

2.13. Granice stosowalności modelu centralnego atomu

Jak długo nieporządek pozostaje silny słuszne jest stosowanie przybliżenie pierwszego rzędu w *locator expansion* (zob. równania (2.48) oraz (2.49)), które nazwałem przybliżeniem centralnego atomu. W tym ostatnim podrozdziale rozważam granice stosowalności tego przybliżenia. Model centralnego atomu przestaje być słuszny, gdy istotne stają się przeskoki pomiędzy węzłami wyższych rzędów, co jest równoważne z uwzględnieniem kolejnych członów w równaniach (2.48) i (2.49). Podczas gdy pierwszy wyraz w (2.49) jest proporcjonalny do $V_{\alpha 0}/\tilde{\sigma}$, drugi człon jest rzędu

$$(2.107) \quad \sum_{\beta} \frac{V_{0\beta} V_{\beta\alpha}}{\tilde{\sigma}^2},$$

gdzie $\bar{\sigma}$ jest miarą nieporządku energii ϵ_α , którą może być odchylenie standardowe rozkładu prawdopodobieństwa albo szerokość połówkowa rozkładu o nieokreślonym odchyleniu standardowym⁵. Gdy powyższe wyrażenie staje się porównywalne z $V_{\alpha 0}/\bar{\sigma}$ model centralnego atomu nie jest już słuszny. Można określić graniczną wartość nieporządku dla określonego α oraz μ , gdy to następuje. Oczywiście granica ta nie jest ostra, a odchylenie od wyników modelu centralnego zwiększa się w sposób ciągły wraz z malejącym nieporządkiem (zob. podrozdział 4.6). Przykładowo dla układu jednowymiarowego o $N = 501$ węzłach, jednostkowej stałej sieciowej oraz dla $\epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$, $\tilde{\sigma} = W/\sqrt{12}$ i $\mu = 1$ przy transporcie z początku do końca łańcucha wyrazy drugiego rzędu (2.107) zrównują się z członami pierwszego rzędu dla $W \approx 47.05$. Natomiast dla $\mu = 2$ krytyczna wartość nieporządku wynosi $W \approx 11.57$. Pokazuje to, że model centralnego atomu pozostaje słuszny w układzie o słabszym nieporządkiem dla wyższych wartości μ czyli w słabiej sprzężonym układzie. Model centralnego atomu załamuje się również dla bardzo dużych układów. Aby to pokazać, można zastosować przybliżenie całkowe wyrażenia (2.107) przykładowo dla $\mu = 1$,

$$(2.109) \quad \frac{1}{\tilde{\sigma}^2} \int_1^{R-1} d\zeta_d r^{d-1} \frac{1}{r(R-r)} dr$$

gdzie rozważam transport od centralnego węzła do granic d -wymiarowego układu. Dla $d = 1$ i $d = 2$ powyższa całka przyjmuje odpowiednio postaci

$$(2.110) \quad \frac{1}{\tilde{\sigma}^2} \frac{4 \ln(R-1)}{R} \quad \text{oraz} \quad \frac{2\pi}{\tilde{\sigma}^2} \ln(R-1).$$

Oznacza to, że gdy $4 \ln(R-1) \sim \tilde{\sigma}$ dla $d = 1$ lub $2\pi R \ln(R-1) \sim \tilde{\sigma}$ dla $d = 2$ wyraz drugiego rzędu zrównują się z pierwszym członem w rozwinięciu (2.48). Nastąpi to w przypadku mniejszego liniowego rozmiaru układu w układzie dwuwymiarowym. Załamanie się modelu centralnego atomu dla rosnącego rozmiaru układu widoczne jest również w założeniach poczynionych w podrozdziale 2.10, mianowicie, że odległość biegunów z_α end energii ϵ_α jest mała względem separacji poziomów energetycznych. Jak to jednak zostało pokazane w podrozdziale 2.4 separacja poziomów energetycznych maleje wraz ze wzrostem rozmiaru układu i dla pewnej jego wartości staje się porównywalne z $|z_\alpha - \epsilon_\alpha|$, skąd wyprowadzenia korzystające z modelu centralnego atomu w podrozdziale 2.10 przestają być słuszne.

⁵Rozkładem o dobrze określonym odchyleniu standardowym jest $\mathcal{U}(-W/2, W/2)$ lub $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$, ale nie jest nim rozkład Cauchy'ego zadany przez funkcję gęstości prawdopodobieństwa

$$(2.108) \quad f(x; x_0, \Gamma) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{(x - x_0)^2 + \Gamma^2/4},$$

gdyż nie posiada dobrze określonego odchylenia standardowego. Niemniej jednak, jako miarę wielkości nieporządku można przyjąć szerokość połówkową rozkładu Γ zamiast odchylenia standardowego we wzorze (2.107).

ROZDZIAŁ 3

Dyfuzja cząstki w układzie z nieporządkiem i sprzężeniami dalekiego zasięgu

W tym rozdziale śledzę dyfuzję cząstki opisywanej modelem przedstawionym w rozdziale 2. Dynamikę dyfuzji określa średnie przemieszczenie kwadratowe¹. Wyniki, które przedstawiam w tym rozdziale, zostały częściowo opublikowane w [5].

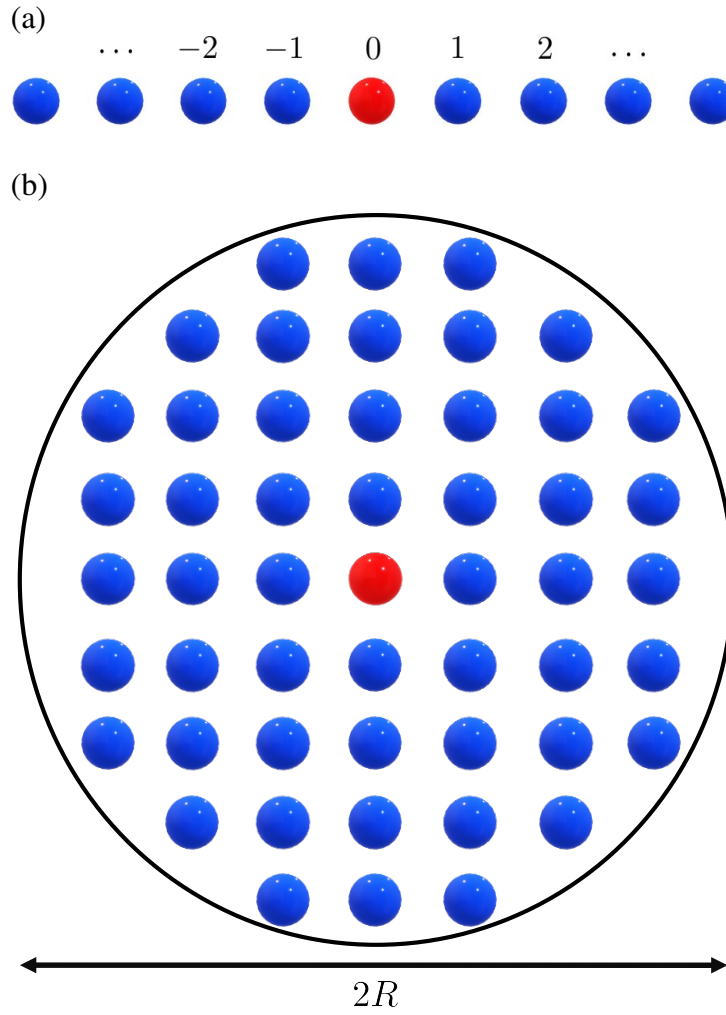
3.1. Opis badanego układu i używanego modelu

Opisany w tym podrozdziale układ fizyczny oraz model tylko nieznacznie różnią się od układu i modelu prowadzonego w poprzednim rozdziale. Badam d -wymiarowy układ złożony z N węzłów rozmieszczonych na sieci regularnej, ograniczonych d -wymiarową sferą o promieniu R . Symulacje numeryczne dotyczą jednak wyłącznie układu jedno- i dwuwymiarowego. W układzie dwuwymiarowym rozważam kolisty obszar sieci o promieniu R , natomiast w przypadku jednowymiarowym rozważam łańcuch równoodległych węzłów o długości $2R$. Oba przypadki są zilustrowane na Rys. 3.1. Odległość pomiędzy węzłami jest stała, dlatego liczba węzłów jest związana z bezwymiarowym promieniem całego układu (mierzonym w stałych sieciowych). Liczba węzłów rośnie wraz z obszarem układu, $N = \zeta_d R^d$. Liniowy wymiar układu jest równy $2R$. ζ_d jest parametrem zależnym od wymiarowości układu (zob. równanie (2.74)). Układ opisywany jest hamiltonianem (2.3),

$$(2.3') \quad H = J \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha| + \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta} |\alpha\rangle\langle\beta| \right),$$

gdzie $|\alpha\rangle$ reprezentuje stan zlokalizowany na węźle α . Skala energii zadana jest przez stałą J , $J\epsilon_{\alpha}$ jest wartością energii na danym węźle. Fizyczna interpretacja energii na węźle jest niejednoznaczna. W zależności od realnego układu fizycznego, który opisuje hamiltonian (2.3') może to być przykładowo potencjał elektryczny/magnetyczny działający na atom/spin na węźle lub, w przypadku gdy rozważana cząstka poruszająca się na sieci jest kwazicząstką wzbudzenia, energia $J\epsilon_{\alpha}$ oznacza fundamentalną energię wzbudzenia „atomu” na węźle α (zob. rozdział 5). $JV_{\alpha\beta}$ jest sprzężeniem pomiędzy węzłem α i β prowadzącym do przeskoku cząstki pomiędzy węzłami (tzw. całka przeskoku). Bezwymiarowe energie ϵ_{α} (w jednostkach stałej J) są nieskorelowanymi zmiennymi losowymi. W symulacjach numerycznych przyjąłem, że energie pochodzą z rozkładu normalnego o zerowej wartości oczekiwanej i odchyleniu standardowym σ , $\epsilon_{\alpha} \in \mathcal{N}(0, \sigma)$. W podrozdziale dotyczącym rozwiązania analitycznego podaję również rozwiązanie dla rozkładu jednostajnego energii $\epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$. Sprzężenie $V_{\alpha\beta}$ ma charakter dalekozasięgowy i jest

¹Ang. *mean square displacement* (MSD)



Rys. 3.1. Schematyczne przedstawienie badanego układu: (a) Jednowymiarowy łańcuch spinów (otwarte warunki brzegowe); (b) Dwuwymiarowy układ atomów na sieci regularnej ograniczony obszarem kołowym o promieniu R .

odwrotnie proporcjonalne do odległości pomiędzy danymi węzłami,

$$(3.1) \quad V_{\alpha\beta} = \begin{cases} \frac{1}{|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|}, & \text{dla } \alpha \neq \beta, \\ 0, & \text{dla } \alpha = \beta, \end{cases}$$

gdzie $\mathbf{r}_\alpha$ jest bezwymiarową współrzędną węzła α (w jednostkach stałej sieciowej). Środkowy węzeł odpowiada $\mathbf{r}_0 = 0$. Sprzężenie (3.1) jest szczególnym przypadkiem rozważanego przeze mnie w poprzednim rozdziale sprzężenia $1/r^\mu$, z tym że dla $\mu = 1$. W tym rozdziale zaczynam od prezentacji wyników dla $\mu = 1$. W ostatnim podrozdziale rozszerzam rozważania dla układu z $\mu > 1$. Taka forma prezentacji bierze się z opublikowania przeze mnie w [5] wyników jedynie dla $\mu = 1$.

Początkowo wyłącznie centralny węzeł jest obsadzony. Zlokalizowana na centralnym węźle cząstka kwantowa będzie następnie dyfundowała na pozostałe węzły. Aby zbadać jakościowo

i ilościowo tę dyfuzję, używam średniego przemieszczenia kwadratowego, zdefiniowanego jako²

$$(3.2) \quad \langle r^2(t) \rangle = \left\langle \sum_{\alpha} r_{\alpha}^2 |c_{\alpha}(t)|^2 \right\rangle,$$

gdzie $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią po zespole statystycznym, w którym uśredniam po N_{rep} realizacjach diagonalnego nieporządku.

3.2. Wyniki symulacji numerycznych

W tym podrozdziale prezentuję wyniki numerycznych symulacji dla modelu opisanego w podrozdziale 3.1 w układzie jedno- i dwuwymiarowym.

A. Metody. Ewolucję amplitud $c_{\alpha}(t)$ znajduję przy pomocy dokładnej diagonalizacji hamiltonianu (2.3') (por. równanie (2.97) oraz zob. Dodatek A),

$$(3.3) \quad c_{\alpha}(t) = \sum_n \exp(-iE_n t) \langle \alpha | n \rangle \langle n | \alpha_0 \rangle,$$

gdzie $|n\rangle$ są stanami własnymi hamiltonianu o energiach własnych E_n , natomiast $\alpha_0 = 0$ odpowiada centralnemu węzłowi. Przez obliczenie stanów i wartości własnych hamiltonianu znajduję ewolucję układu. Mogę też obliczyć średnie przemieszczenie kwadratowe. Dla każdej z N_{rep} realizacji nieporządku dokonuję diagonalizacji hamiltonianu. Następnie wykonuję zwykłą średnią arytmetyczną po wszystkich realizacjach.

W symulacji występują dwa istotne parametry — liczba węzłów N oraz wielkość nieporządku mierzona odchyleniem standardowym σ losowych energii ϵ_{α} . Badam charakter dyfuzji w zależności od tych dwóch parametrów.

B. Potrójna dynamika dyfuzji. Średnie przemieszczenie kwadratowe od centralnego węzła jest przedstawione na Rys. 3.2 dla różnych rozmiarów układu i wielkości nieporządku. Dostrzec można trzy następujące po sobie fazy transportu wzbudzenia. Najpierw transport ma charakter balistyczny ze stałą prędkością v ,

$$(3.4) \quad \langle r^2(t) \rangle = v^2 t^2 \quad \text{dla} \quad 0 < t < t_0.$$

Prędkość ta zależy od rozmiaru układu (zob. Rys. 3.2(a,b), ale nie zależy od nieporządku (zob. Rys. 3.2(c,d)).

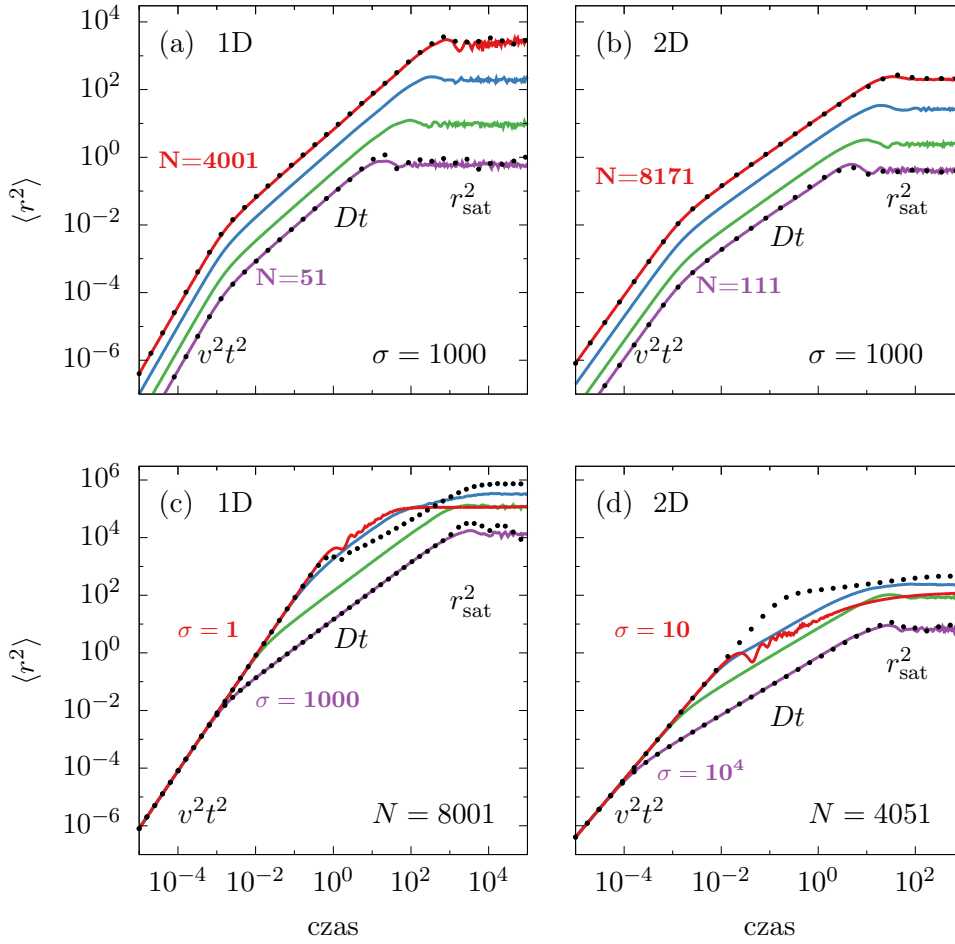
W pewnej chwili czasu t_0 dyfuzja balistyczna przechodzi w dyfuzję normalną ze stałą dyfuzji D ,

$$(3.5) \quad \langle r^2(t) \rangle = Dt \quad \text{dla} \quad t_0 < t < t_1.$$

²Ogólnie można definiować ν -ty moment odległości jako

$$\langle r^{\nu}(t) \rangle = \left\langle \sum_{\alpha} r_{\alpha}^{\nu} |c_{\alpha}(t)|^2 \right\rangle.$$

Wg powyższej definicji średnie przemieszczenie kwadratowe jest drugim ($\nu = 2$) momentem.



Rys. 3.2. Średnie przemieszczenie kwadratowe wzbudzenia od centralnego węzła w funkcji czasu: (a,b) Dla różnych rozmiarów układu i tego samego nieporządku $\sigma = 1000$; (c,d) Dla różnej siły nieporządku i tego samego rozmiaru układu. Panele (a,c) odpowiadają dyfuzji w układzie jednowymiarowym, natomiast (b,d) odpowiadają dyfuzji w układzie dwuwymiarowym. Kropkowane linie pokazują wyniki z symulacji korzystających z „modelu centralnego atomu”. Źródło: adaptacja rysunku z pracy [5].

Wyniki symulacji pokazują, że współczynnik dyfuzji D rośnie razem z rozmiarem układu (zob. Rys. 3.2(a,b)), ale maleje ze wzrostem nieporządku (zob. Rys. 3.2(c,d)). Z warunku ciągłości otrzymuje się czas przejścia pomiędzy powyższymi fazami,

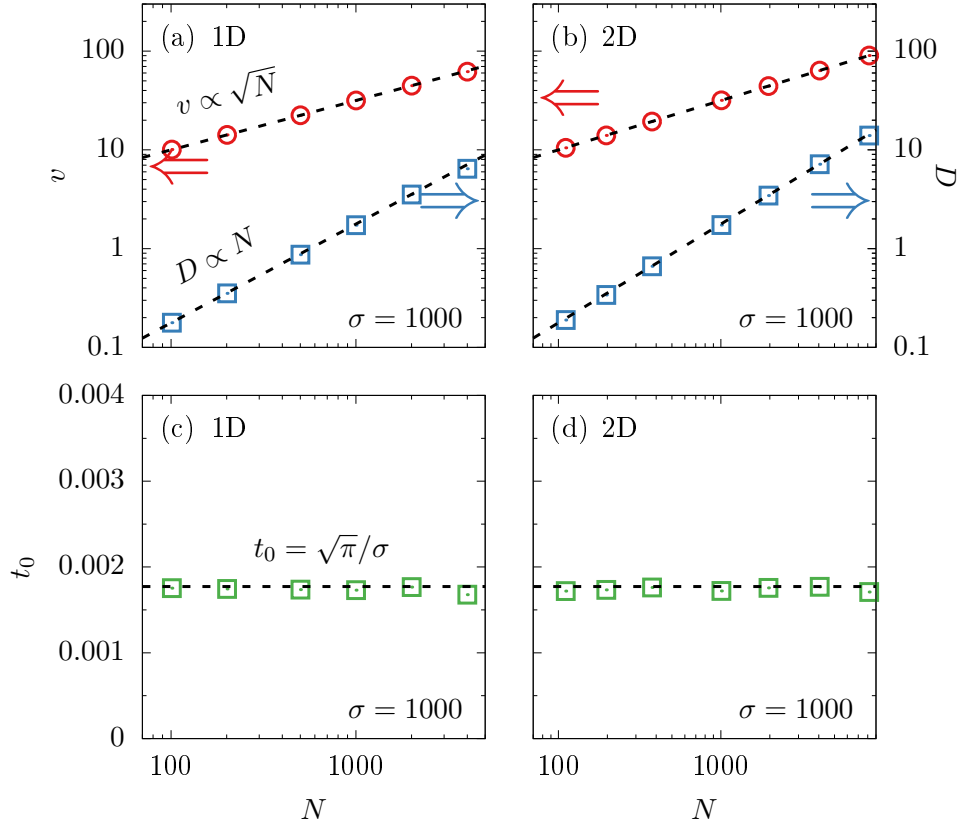
$$(3.6) \quad t_0 = D/v^2.$$

Wartość t_0 jest niezależna od rozmiaru układu, ale maleje ze wzrostem nieporządku (zob. Rys. 3.3(c,d) oraz Rys. 3.4(c,d)).

Ostatecznie w pewnej chwili czasu t_1 ewolucja ustaje na określonym poziomie wysycenia,

$$(3.7) \quad \langle r^2(t) \rangle = r_{\text{sat}}^2, \quad \text{dla } t > t_1.$$

Oczywiście zakres dyfuzji musi być ograniczony w układzie o skończonym rozmiarze. Jakkolwiek na Rys. 3.2 wartość saturacji rośnie z liczbą węzłów, ale zawsze jest dużo poniżej kwadratu



Rys. 3.3. Parametry dynamiczne w funkcji rozmiaru układu. (a,b) prędkości i fazy [ruch balistyczny] (czerwone koła, lewa oś) oraz współczynnik dyfuzji drugiej fazy ruchu (niebieskie kwadraty, prawa oś). (c,d) Czas przejścia pomiędzy pierwszą a drugą fazą. Przerywanymi liniami zaznaczono formuły analityczne otrzymane z modelu centralnego.

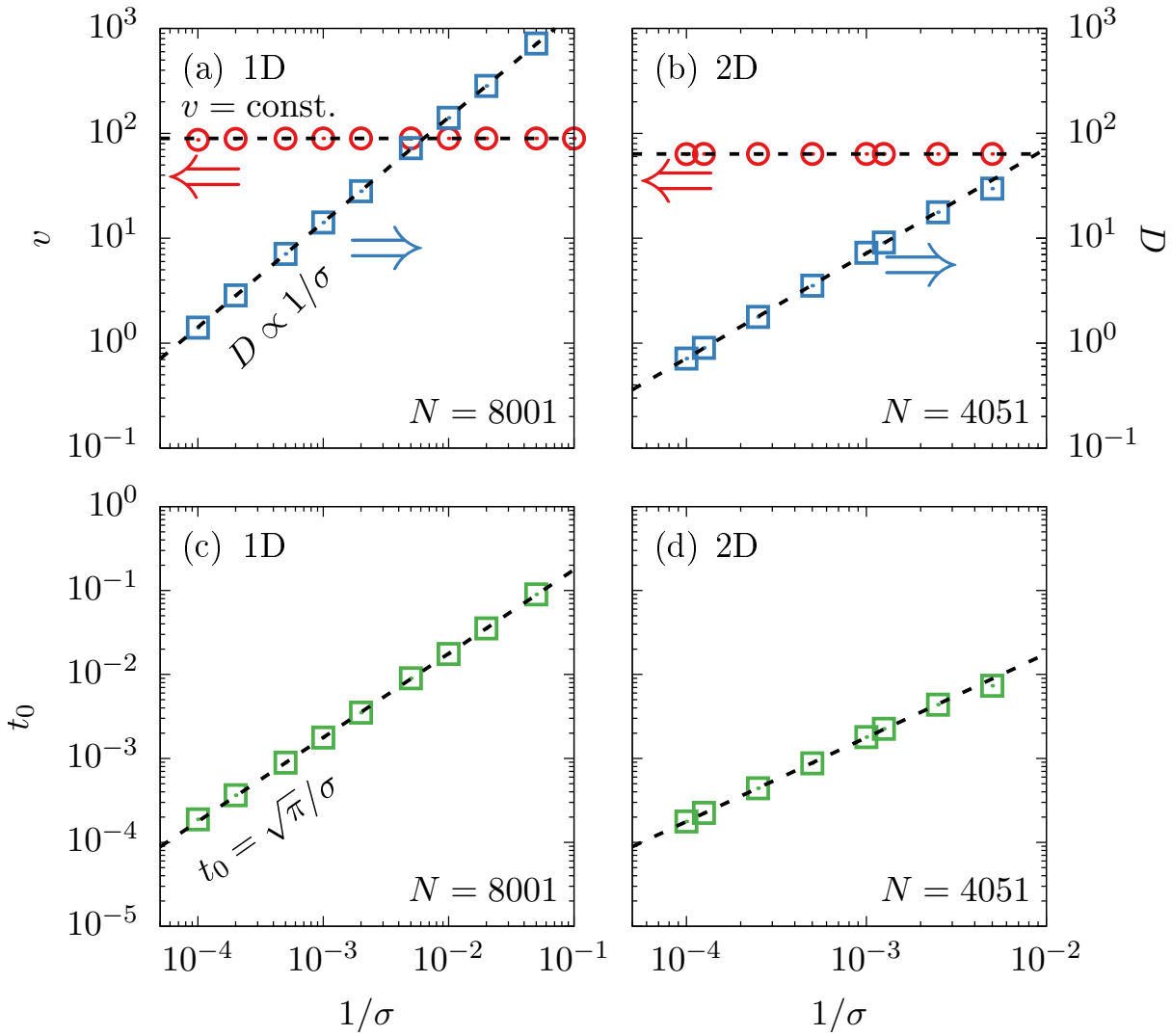
Źródło: [5].

promienia układu i maleje ze wzrostem nieporządku. Drugi czas przejścia, t_1 , znajduje się przez warunek ciągłości,

$$(3.8) \quad t_1 = r_{\text{sat}}^2 / D.$$

C. Parametry dynamiczne. Aby zbadać zależność wielkości dynamicznych v , D oraz r_{sat}^2 , znalazłem ewolucję dla wielu różnych wartości N i σ a następnie dopasowywałem funkcje potęgowe dla odpowiadających im przedziałów czasu, odpowiednio jak w (3.4), (3.5) i (3.7). Zależności wielkości dynamicznych od N i σ są funkcjami potęgowymi (proste linie w skali podwójnie logarytmicznej) o wykładniku bliskim liczbie całkowitej lub wymiernej.

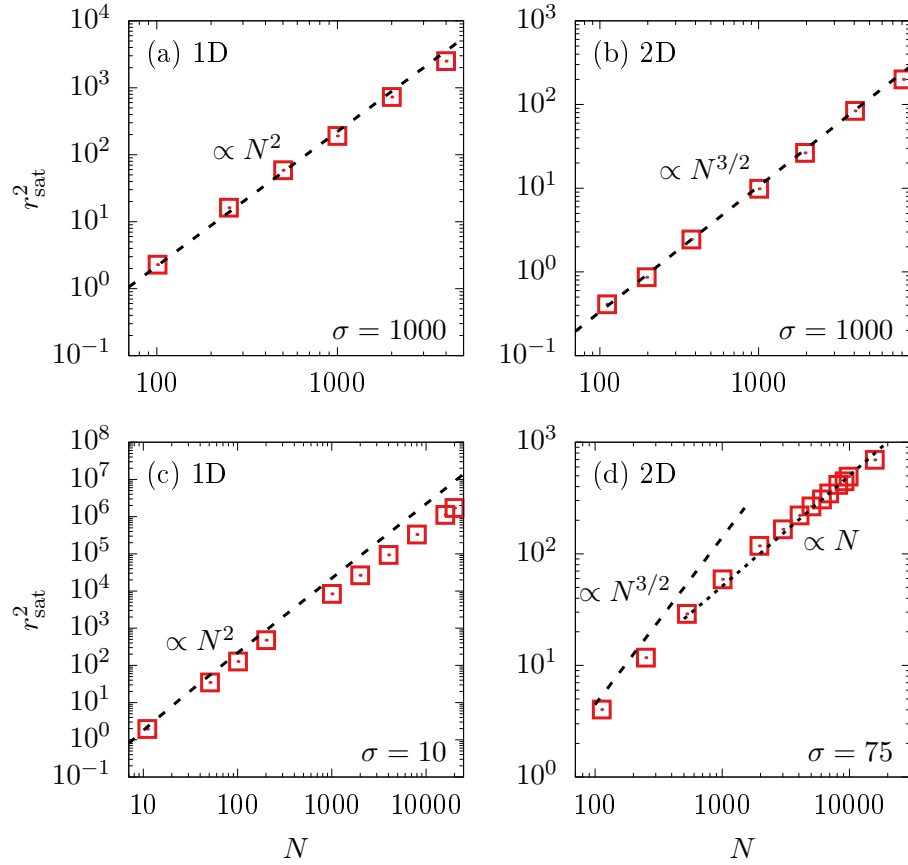
(i). *Prędkość balistyczna i współczynnik dyfuzji.* Zależność od rozmiaru układu dla prędkości balistycznej i współczynnika dyfuzji jest pokazana na Rys. 3.3(a, b). Dla jednowymiarowego łańcucha i dwuwymiarowego układu zależności nie różnią się jakościowo. Prędkość rośnie z rozmiarem jak $\sqrt{N}$, podczas gdy współczynnik dyfuzji rośnie liniowo z N . Konsekwencją powyższych zależności jest niezależność czasu t_0 od rozmiaru układu (zob. wzór (3.6) oraz Rys. 3.3(c,d)).



Rys. 3.4. Parametry dynamiczne w zależności od (odwrotności) siły nieporządku. (a,b) prędkości i fazy [ruch balistyczny] (czerwone koła, lewa oś) oraz współczynnik dyfuzji drugiej fazy ruchu (niebieskie kwadraty, prawa oś). (c,d) Czas przejścia pomiędzy pierwszą a drugą fazą. Przerywanymi liniami zaznaczono formuły analityczne otrzymane z modelu centralnego. *Źródło:* [5].

Relację łączącą wielkości dynamiczne z nieporządkiem przedstawiam na Rys. 3.4(a,b). Podczas gdy prędkość balistyczna jest niezależna od σ , jak to już zostało powiedziane, współczynnik dyfuzji jest odwrotnie proporcjonalny do σ w układzie o dowolnym wymiarze.

(ii). *Poziom wysycenia.* Następnie badam poziom wysycenia jako funkcję N [Rys. 3.5] oraz σ [Rys. 3.6]. Występuje tu różnica pomiędzy układem jedno- i dwuwymiarowym. W układzie jednowymiarowym r_{sat}^2 rośnie jak $N^2 \propto R^2$ dla silnego nieporządku, podczas gdy dla średniego nieporządku obserwuje się w przybliżeniu prawo potęgowe, ale o mniejszym wykładniku [Rys. 3.5(a,c)]. W układzie dwuwymiarowym $r_{\text{sat}}^2 \propto N^{3/2} \propto R^3$ dla silnego nieporządku [Rys. 3.5(b)], natomiast dla słabszego nieporządku jedynie na krótkich odległościach od centrum [Rys. 3.5(d)]. Ten rodzaj zależności potęgowej w dwóch wymiarach oznacza, że poziom saturacji rośnie szybciej niż rozmiar układu, dlatego wzbudzenie musi osiągać granice układu



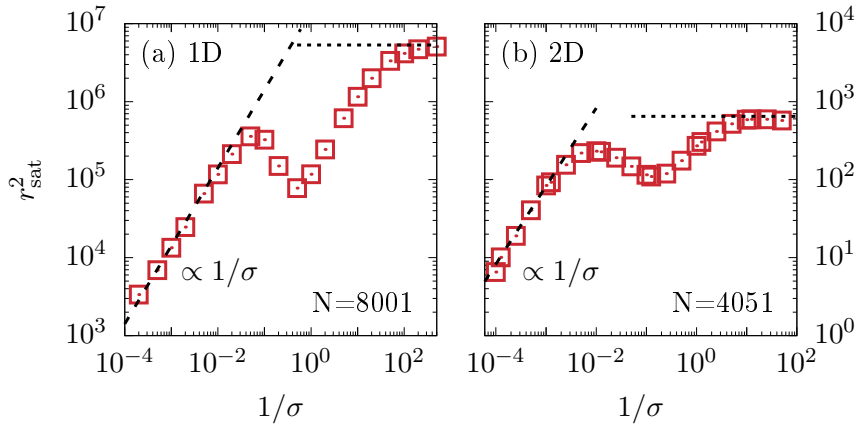
Rys. 3.5. Zasięg dyfuzji w funkcji liczby węzłów dla układu jednowymiarowego (a,c) i dwuwymiarowego (b,d). Przerywane kreskowane linie pokazują wyniki analityczne otrzymane przy wykorzystaniu *modelu centralnego atomu*. Kropkowana linia (d) jest liniowym dopasowaniem dalszej części wykresu. Źródło: [5].

dla dostatecznie dużej liczby węzłów (rzędu σ^2). Stąd, od pewnego momentu poziom wysycenia zaczyna rosnąć liniowo z $N \propto R^2$, co również jest widoczne na Rys. 3.5(d). Innymi słowy, poziom wysycenia jest ograniczony przez rozmiar układu.

Zarówno dla $d = 1$ jak i $d = 2$, r_{sat}^2 okazuje się być proporcjonalne do $1/\sigma$ dopóki $\sigma \gg 1$. Dla malejącego nieporządku, r_{sat}^2 zaczyna oscylować, by osiągnąć stałą wartość dla $\sigma \rightarrow 0$. Granica znikomego nieporządku odzwierciedla jednorodny rozkład wzbudzenia pośród wszystkich węzłów, tj. charakterystykę sieci bez nieporządku, która z grubsza zadaje górną granicę dla $\langle r^2(t) \rangle$. Poziom saturacji dla jednorodnego rozprzestrzeniania się ekscytynu wynosi $r_{\text{sat}}^2 = R^2/3$ oraz $r_{\text{sat}}^2 = R^2/2$ odpowiednio dla $d = 1$ i $d = 2$. Są one oznaczone poziomymi kropkowanymi liniami na Rys. 3.6. Czas, w którym rozpoczyna się saturacja jest więc proporcjonalny do $N \propto R$ oraz $\sqrt{N} \propto R$ dla odpowiednio, $d = 1$ i $d = 2$, a więc do liniowego rozmiaru układu w obu przypadkach. Czas ten jest niezależny od siły nieporządku.

D. Potęgowa lokalizacja.

(i). *Układ jednowymiarowy.* Przez prosty argument wykorzystujący zliczanie rezonansów najniższego rzędu można pokazać, że liczba węzłów rezonujących z centralnym, tj. początkowo



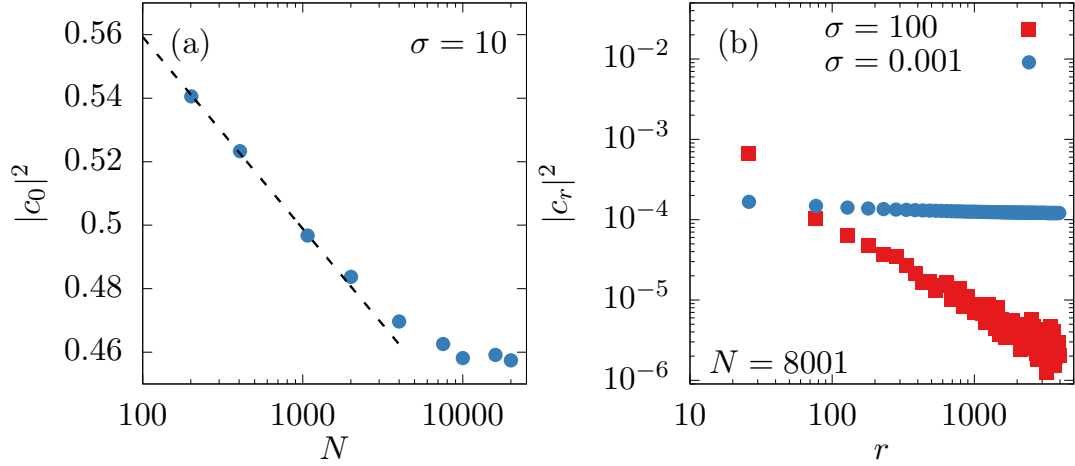
Rys. 3.6. Zasięg dyfuzji w funkcji odchylenia standardowego energii na węźle w układzie jednowymiarowym (a) i dwuwymiarowym (b). Przerywane kreskowane linie pokazują wyniki analityczne otrzymane przy wykorzystaniu *modelu centralnego atomu*. Kropkowane linie reprezentują wartości odpowiadające układowi bez nieporządku (równomierne rozmieszczenie wzbudzenia w układzie).

Źródło: [5].

wzbudzonym węzłem na odległości r od niego, jest proporcjonalna do $1/r$. W układzie jednowymiarowym, gdy łańcuch się wydłuża, ze względu na rozprzestrzenianie się wzbudzenia do rezonujących węzłów, obsadzenie dalekich węzłów rośnie jak $\ln N$, wartość r_{sat}^2 rośnie jak N^2 , a obsadzenia w granicy długiego czasu będą rozłożone jak $1/r$. To przewidywanie dla r_{sat}^2 zgadza się z wynikami symulacji dla dużego nieporządku, ale odstępstwo od tego prawa widać dla $\sigma = 10$ [Rys. 3.5(c)]. Rosnące obsadzenie odległych węzłów powinno zmniejszać obsadzenie centralnego węzła $|c_0|^2$ (prawdopodobieństwo przeżycia) jak $1 - A \ln N$ (gdzie A jest pewną dodatnią stałą), dopóki prawdopodobieństwo nie zmaleje wystarczająco, by konieczne było uwzględnienie poprawek wyższych rzędów w zliczaniu rezonansów. Potwierdzają to wyniki symulacji zaprezentowane na Rys. 3.7, gdzie logarytmiczną zależność reprezentuje kreskowana linia trendu, chociaż wąski zakres zmienności $|c_0|^2$ może nie być wystarczający do udowodnienia subtelnej zależności logarytmicznej. Poziom wysycenia dla $N \gtrsim 10^4$ ma raczej dużą wartość szczytkowego obsadzenia centralnego węzła [Rys. 3.7(a)].

Rozkład obsadzeń asymptotycznych $|c_r(\infty)|^2$ wykazuje prawo potęgowe przez wiele rzędów wielkości długości łańcucha z wykładnikiem bliskim jedności dla silnego nieporządku (czerwone kwadraty na Rys. 3.7(b)). To zachowanie jest charakterystyczne dla reżimu silnego nieporządku odpowiadającego potęgowej zależności r_{sat}^2 od σ (lewa asymptota na Rys. 3.6(a)). Natomiast w reżimie małego nieporządku (prawa asymptota na Rys. 3.6(a)), obsadzenia są równomiernie rozprowadzone po całym łańcuchu, jak wnioskujemy z wartości asymptotycznych na Rys. 3.7(b) (niebieskie koła).

(ii). *Układ dwuwymiarowy.* Podobna potęgowa lokalizacja stanów asymptotycznych jest obserwowana w układzie dwuwymiarowym, co pokazują na Rys. 3.8, gdzie narysowałem średnie obsadzenie węzła w funkcji odległości od węzła centralnego. Ponieważ w układzie dwuwymiarowym odległości niektórych węzłów niewiele się od siebie różnią, Rys. 3.7 przedstawia histogram o szerokości przedziału równym jednej lub dwóm stałym sieciowym (w zależności od rozmiaru

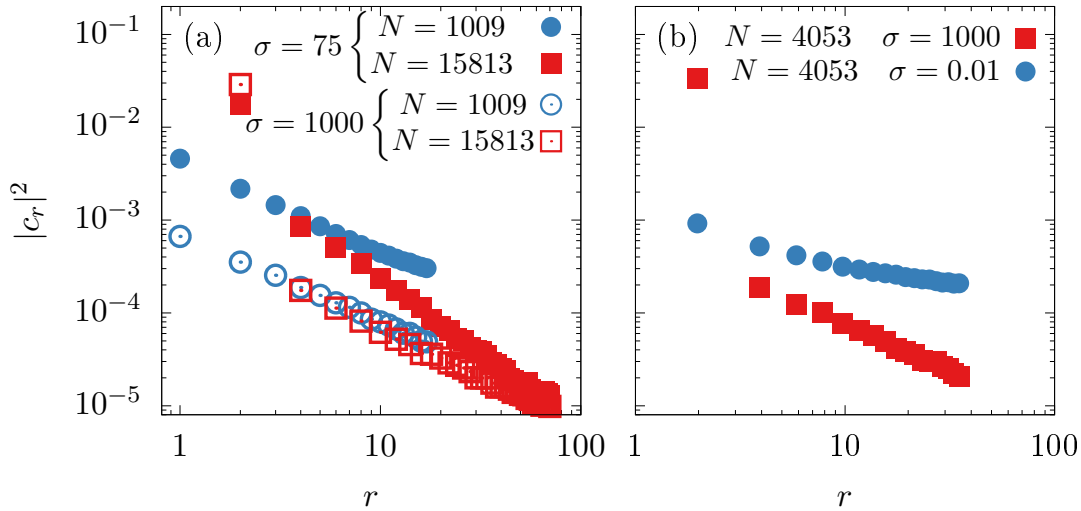


Rys. 3.7. (a) Asymptotyczne ($t \rightarrow \infty$) obsadzenie centralnego węzła w jednowymiarowym łańcuchu atomów, jako funkcja długości łańcucha dla $\sigma = 10$. Linia przerywaną zaznaczono trend logarytmiczny. (b) Zależność asymptotycznego obsadzenia zadanego węzła od odległości (numeru węzła) w jednowymiarowym łańcuchu atomów dla wartości N oraz σ sigma podanych na wykresie.

Źródło: adaptacja rysunku z pracy [5].

układu dla lepszej widoczności). Jak widać (pełne symbole), dla średniej siły nieporządku wykładnik zależności potęgowej wzrasta co do wartości bezwzględnej, gdy układ rośnie. Wartości otrzymane z dopasowania funkcji potęgowej do danych otrzymanych z symulacji zmienia się od -1.0 dla $N = 197$ do -1.7 dla $N = 32017$ (dopasowanie zostało przeprowadzone dla centralnej części wykresu, wykazującej zachowanie potęgowe, wynik może być w pewnej mierze zależny od wyboru obcięcia). Wszystkie te wartości są większe niż -2 i dlatego odpowiada to rozkładowi o długich ogonach w dwóch wymiarach, którego norma jest rozbieżna w granicy nieskończonego łańcucha. Wartości te zdają się być proporcjonalne do $\ln N$ dla rozmiarów układu dostępnych dla numerycznych symulacji i dlatego nie było możliwe określenie asymptotycznej wartości wykładnika dla $N \rightarrow \infty$.

Odmienne zachowanie występuje w układach z silnym nieporządkiem (puste symbole na Rys. 3.8(a)). Widać, że nachylenie potęgowej zależności jest stałe. Wykładniki wyznaczone przez dopasowanie funkcji potęgowej oscylują (ze względu na wewnętrzny nieporządek i niepewność dopasowania) wokół wartości -1 , która odpowiada zależności $r_{\text{sat}}^2 \propto N$ na Rys. 3.5(b). To oznacza, że w tym przedziale rozmiarów układu, asymptotyczny zakres dyfuzji rośnie z rozmiarem układu przez rozszerzanie zależności $\propto 1/r$ do coraz większych odległości na koszt obsadzenia centralnego węzła, dopóki zależność $\propto N^{3/2}$ się nie załamie, podobnie do sytuacji przedstawionej na Rys. 3.5(d), ale daleko poza możliwościami mocy obliczeniowej komputera. Gdy porówna się zależność potęgową dla dwóch różnych wielkości nieporządku, można dojść do nieoczekiwanej konkluzji. Mianowicie, z formalnego punktu widzenia skupionego na wartości wykładnika, lokalizacja w układzie o umiarkowanym nieporządkiem jest silniejsza (wartość bezwzględna wykładnika jest większa) niż w układzie z silnym nieporządkiem. Nie jest to



Rys. 3.8. Asymptotyczne ($t \rightarrow \infty$) obsadzenie węzłów w funkcji odległości od centralnego węzła w układzie dwuwymiarowym dla: (a) dla dwóch różnych wartości σ oraz dwóch różnych wartości liczby węzłów N ; (b) dla zadanej wartości liczby węzłów N i dwóch różnych wartości σ jak pokazano. Źródło: [5].

oczywiście prawdziwy wniosek, gdyż wartość szczytkowego prawdopodobieństwa centralnego węzła spada mniej od początkowej wartości w przypadku wyższego nieporządku (silniejsza lokalizacja), tak jak oczekuje się od układu z większym nieporządkiem. Interesujące jest również to, że obsadzenie najdalszych węzłów w układzie o $N = 15813$ węzłach jest ilościowo podobne w dwóch różnych reżimach nieporządku pokazanych na Rys. 3.8(a).

Powyższy trend w zależności asymptotycznego rozkładu obsadzeń od siły nieporządku nie może pozostać prawidłowy w przypadku zmniejszania siły nieporządku, gdy obsadzenia powinny rozkładać się po równo w całym układzie w granicy jednorodnego układu. Istotnie, jak pokazano na Rys. 3.8(b) dla bardzo słabego nieporządku, układ dąży do jednorodnego rozkładu obsadzenia, chociaż – nieoczekiwanie – słaby efekt lokalizacji jest ciągle widoczny dla $\sigma = 0.01$.

E. Model centralnego atomu. Poza symulacją pełnego modelu opisanego hamiltonianem (2.3) diskutowanym wcześniej, zbadałem dynamikę modelu centralnego atomu (zob. podrozdz. 2.10-2.12). Wyniki symulacji dla modelu centralnego węzła przedstawiam na Rys. 3.2 kropkowanymi liniami. Można dostrzec, że w układzie o silnym nieporządku ewolucja jest prawie taka sama jak w przypadku pełnego modelu. Oznacza to, że dla silnego nieporządku dyfuzja jest zdominowana przez bezpośrednie przeskoki z centralnego węzła do odległych atomów, co jest możliwe dzięki sprzężeniu dalekiego zasięgu.

W następnym podrozdziale, korzystając z zależności wyprowadzonych pod koniec rozdziału 2, znajduję analityczne formuły na średnie przemieszczenie kwadratowe w trzech fazach dyfuzji. Pokazuję, jak parametry dynamiczne v , D , r_{sat}^2 , t_0 , t_1 mogą zostać powiązane z rozmiarem układu N i siłą nieporządku σ , o ile model centralnego atomu jest słuszny. Przywołuję również wzory wykazujące potęgową lokalizację cząstki.

3.3. Przybliżone rozwiązanie analityczne

W tym podrozdziale prezentuję przybliżone podejście analityczne do rozważanego problemu, które jest dostępne przy użyciu modelu centralnego atomu dla silnie nieregularnego układu (reżim silnego nieporządku). Wykorzystuję wzory wyprowadzone w podrozdziałach (2.10-2.12) do wyjaśnienia potrójnej dynamiki $\langle r^2(t) \rangle$.

Średnie przemieszczenie kwadratowe (3.2) może być zapisane w postaci

$$(3.9) \quad \langle r^2(t) \rangle = \left\langle \sum_r r^2 \sum_{k=1}^{n_r} |c_{r,k}(t)|^2 \right\rangle,$$

gdzie indeks k przebiega po wszystkich n_r atomach odległych o r od centrum. Suma przebiega zatem po d -wymiarowych sferach o promieniu r , na których leży n_r atomów. Przechodząc do przybliżenia ciągłego rozkładu przestrzennego atomów oraz zamieniając średnią na całkę po funkcji gęstości rozkładu prawdopodobieństwa separacji poziomów energetycznych otrzymuję

$$(3.10) \quad \langle r^2(t) \rangle = \int_0^R d\zeta_d r^{d-1} dr \int_{-\infty}^{\infty} f_r(u) \frac{\sin^2(ut/2)}{(u/2)^2} du,$$

gdzie skorzystałem z równania (2.92) na obsadzenie danego wężła oraz zastąpiłem sumę po odległościach od centrum całką ($\sum_r \rightarrow d\zeta_d \int r^{d-1} dr$). Całkę po rozkładzie prawdopodobieństwa policzyłem w podrozdziale 2.12. Pozostaje mi skorzystać z otrzymanych wyników i obliczyć całkę po zmiennej r .

A. Faza balistyczna. Najpierw, dla krótkich czasów, korzystam z równania (2.100) oraz (3.4), by otrzymać prędkość w ruchu balistycznym,

$$(3.11) \quad v^2 = \int_0^R \zeta_d dr^{d-1} dr \int_{-\infty}^{\infty} f_{\infty}(u) du = \zeta_d R^d = N.$$

Zależność tę narysowałem kreskowaną linią na Rys. 3.3. Doskonale pasuje ona do danych numerycznych. Warto zauważyć, że jest niezależna od przyjętego rozkładu energii ϵ_{α} .

B. Dyfuzja standardowa. Dla średnich czasów korzystam z równań (2.101) oraz (3.5) i znajduję współczynnik dyfuzji

$$(3.12) \quad D = \int_0^R dr \zeta_d dr^{d-1} 2\pi t f_{\infty}(0) = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi} N}{\sigma} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{N}(0, \sigma), \\ \frac{2\pi N}{W} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2). \end{cases}$$

Ponownie zależność współczynnika dyfuzji od N i σ przedstawiam na Rys. 3.3(a,b) oraz Rys. 3.4(a,b) linią kreskową, która doskonale dopasowuje się do danych otrzymanych w symulacjach numerycznych. Używając równania (3.6) znajduję czas przejścia od fazy balistycznej do dyfuzyjnej

$$(3.13) \quad t_0 = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{\sigma} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{N}(0, \sigma), \\ \frac{2\pi}{W} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \end{cases}$$

który, dla dostatecznie dużego σ (lub W), pasuje do danych numerycznych, jak pokazano na Rys. 3.4(c,d), co jest prostą konsekwencją dobrego dopasowania wzorów (3.11) oraz (3.12) do numerycznie wyznaczonej prędkości oraz stałej dyfuzji. Zakres transportu balistycznego jest więc określony przez

$$(3.14) \quad \langle r^2(t_0) \rangle = v^2 t_0^2 = \begin{cases} \frac{\pi N}{\sigma^2} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{N}(0, \sigma), \\ \frac{4\pi^2 N}{W^2} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2). \end{cases}$$

W jednym wymiarze ($N \propto R$) jest on zawsze mniejszy od rozmiaru układu pod warunkiem występowania silnego nieporządku.

C. Saturacja. Ostatecznie, następuje saturacja. Poziom saturacji można obliczyć ze wzoru (3.10), wykorzystując wzór (2.105) (lub Tabelę 2.1). Poziom saturacji wynosi więc

$$(3.15) \quad r_{\text{sat}}^2 = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}\zeta_d}{2\sigma} \int_0^R r^d dr = \frac{\sqrt{\pi}\zeta_d}{2\sigma} \frac{d}{d+1} R^{d+1} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{N}(0, \sigma), \\ \frac{\pi\zeta_d}{W} \int_0^R r^d dr = \frac{\pi\zeta_d}{W} \frac{d}{d+1} R^{d+1} & \text{dla } \epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2). \end{cases}$$

Powyższa zależność (3.15) jest oznaczona na Rys. 3.5 oraz Rys. 3.6 przy pomocy przerywanych linii i doskonale pokrywa się z wynikami symulacji numerycznych, dopóki nieporządek jest silny, a rozmiar układu nie za duży.

Czas rozpoczęcia fazy saturacji znajduję przez warunek ciągłości $\langle r^2(t) \rangle$, $Dt_1 = r_{\text{sat}}^2$. Z równań (3.12) oraz (3.15) otrzymuję

$$(3.16) \quad t_1 = \frac{1}{2} \frac{d}{d+1} \frac{1}{V_R},$$

gdzie V_R jest sprzężeniem centralnego węzła z atomami leżącymi na obrzeżach układu. Jest to możliwie najmniejsze sprzężenie z centralnym węzłem występujące w układzie. Powyższy wynik również pozostaje w zgodzie z rezultatami symulacjami.

Dla wyjaśnienia potęgowej lokalizacji [Rys. 3.7 oraz Rys. 3.8] pragnę tu przywołać wzór (2.105) na asymptotyczne obsadzenie węzłów,

$$(2.105') \quad \langle |c_r|^2 \rangle = 2V_r f_\infty(0) \frac{\pi}{2}.$$

Dla $V_r = 1/r$ pozostaje on w zgodności z danymi numerycznymi dla układu jednowymiarowego, przedstawionymi na Rys. 3.7. Odpowiada to szcątkowemu obsadzeniu centralnego

węzła równemu $1 - A \ln N$ w reżimie silnego nieporządku, co również pokrywa się z danymi numerycznymi na Rys. 3.7(a). Jak to pokazałem na Rys. 3.8, taka sama zależność jest widoczna dla układu dwuwymiarowego w reżimie dużego nieporządku. Nie powinno to dziwić, gdyż obsadzenie maleje zawsze z liniowym rozmiarem układu, niezależnie od wymiarowości przestrzennej układu.

3.4. Analiza średniego przemieszczenia kwadratowego dla wykładnika $\mu > 1$

W tym podrozdziale prezentuję dynamikę dyfuzji kwazicząstki, rozszerzając rodzaj sprzężenia (3.1) do postaci bardziej ogólnej (2.2), którą analizowałem już w poprzednim rozdziale. W tym przypadku sprzężenia maleją potęgowo z odległością, tj.

$$(3.17) \quad V_r = 1/r^\mu.$$

Pokażę, jak zmieniają się współczynniki dynamiczne (v , D , r_{sat}^2 , t_0 , t_1) w zależności od wykładnika μ . do wzoru (3.9) podstawię ogólną postać sprzężenia (3.17). Wtedy, średnie przemieszczenie kwadratowe $\langle r^2(t) \rangle$ wynosi

$$(3.18) \quad \langle r^2(t) \rangle = \int \zeta_d dr^{d+1-2\mu} dr \int_{-\infty}^{\infty} f_r(u) \frac{\sin^2(ut/2)}{(u/2)^2} du.$$

Podobnie jak poprzednio korzystam z wyników rozdziału 2.12. Oczywiście potrójna dynamika $t^2 \rightarrow t \rightarrow \text{const.}$ pozostaje niezmienna, gdyż wynika ona z postaci obsadzenia $\langle |c_r|^2 \rangle$ wyrażonego formułą (2.92). Zmieni się natomiast zależność parametrów dynamicznych od rozmiaru układu. Aby ją znaleźć, potrzebuję jedynie obliczyć całkę po r .

A. Prędkość balistyczna oraz współczynnik dyfuzji. Biorąc (2.100) znajduję kwadrat balistycznej prędkości,

$$(3.19) \quad v^2 = \zeta_d d I_1,$$

natomiast biorąc (2.101) znajduję współczynnik dyfuzji,

$$(3.20) \quad D = 2\pi f_\infty(0) \zeta_d d I_1,$$

gdzie

$$(3.21) \quad I_1 = \int r^{d+1-2\mu} dr.$$

Górną granicę całkowania I_1 określa promień układu, natomiast dolna granica, w zależności od tego, czy wykładnik μ pozwala na uwzględnienie środkowego węzła, czy nie, będzie równa 0 lub 1^3 . Zajmę się teraz zbadaniem całki I_1 w zależności od wartości wykładnika μ . Rozważę trzy przypadki, mianowicie gdy wykładnik nad r jest większy, równy lub mniejszy od -1 .

³Granice całkowania mogłyby zostać wybrane od $1/2$ do $R + 1/2$. w przypadku jednak gdy $\mu < d/2 + 1$ doprowadziłoby to do nieeleganckiego wyrazu wolnego, który w granicy dużych układów jest zaniedbywalny. Podobnie można by całkować zawsze od 1 do R bez większego błędu w granicy dużego R , jednak to doprowadziłoby do pomijalnego członu przy liczeniu t_1 dla $\mu < d/2 + 1$. Tam, gdzie tego wymaga dokładność całkowanie przebiega od 1 do R , natomiast dla $\mu < d/2 + 1$ całkę I_1 mogę bez problemu scałkować, przyjmując dolną granicę całkowania równą zero.

(i). *Przypadek 1.* Dla $\mu < d/2 + 1$,

$$(3.22) \quad I_1 = \int_0^R r^{d+1-2\mu} dr = \frac{R^{d+2-2\mu}}{d+2-2\mu}.$$

Całka ta jest dobrze określona dla skończonego układu, natomiast w granicy termodynamicznej jest potęgowo rozbieżna do nieskończoności.

Prędkość pierwszej fazy ruchu oraz współczynnik dyfuzji rosną z rozmiarem układu, dopóki $\mu \leq d/2 + 1$, co oznacza $\mu < 3/2$ dla układu jednowymiarowego oraz $\mu < 5/2$ dla układu dwuwymiarowego. Dopóki $\mu \geq 1$, prędkość v oraz współczynnik dyfuzji D rosną nie szybciej niż liniowy rozmiar układu. W przeciwnym przypadku spodziewane będzie możliwe osiągnięcie granic układu przez cząstkę i załamanie się powyższego trendu już w fazie balistycznej lub dyfuzyjnej, tak jak to było dla poziomu saturacji w przypadku $\mu = 1$ (por. Rys. 3.5(d)).

(ii). *Przypadek 2.* Dla $\mu = d/2 + 1$,

$$(3.23) \quad I_1 = \int_1^R \frac{dr}{r} = \ln R.$$

Również tutaj występuje rozbieżność w $R \rightarrow \infty$, jednak słabsza niż w (3.22).

(iii). *Przypadek 3.* Gdy $\mu > d/2 + 1$,

$$(3.24) \quad I_1 = \int_1^R r^{d+1-2\mu} dr = \frac{1}{2\mu - 2 - d} \left(1 - \frac{1}{R^{2\mu-2-d}} \right).$$

Powyższa całka w granicy termodynamicznej jest dobrze określona i równa $(2\mu - 2 - d)^{-1}$.

Dodatkowo pierwszy czas przejścia wynosi tyle samo niezależnie od μ ,

$$(3.25) \quad t_0 = D/v^2 = 2\pi f_\infty(0).$$

B. Poziom saturacji. Poziom saturacji dla dowolnego μ przyjmuje postać (por. z równaniem (3.15) dla $\mu = 1$),

$$(3.26) \quad r_{\text{sat}}^2 = \pi f_\infty(0) \zeta_d d I_2,$$

gdzie

$$(3.27) \quad I_2 = \int r^{d+1-\mu} dr.$$

Podobnie jak poprzednio, zbadam zachowanie się całki I_2 w zależności od wykładnika μ .

(i). *Przypadek 1.* Dla $\mu < d + 2$,

$$(3.28) \quad I_2 = \int_0^R r^{d+1-\mu} dr = \frac{R^{d+2-\mu}}{d+2-\mu} \propto N^{\frac{d+2-\mu}{d}}.$$

Poziom saturacji rośnie wraz z rozmiarem układu. Dodatkowo, jeśli $d > \mu$, poziom saturacji rośnie szybciej niż liniowy rozmiar układu, co musi prowadzić w pewnym momencie do zmiany trendu na $r_{\text{sat}}^2 \propto R^2$, gdy poziom saturacji zbliża się do granic układu.

μ	0		$\frac{d}{2} + 1$		$d + 2$	
I_1	$\frac{R^{d+2-2\mu}-1}{d+2-2\mu}$		$\ln R$	$\frac{\left(1 - 1/R^{2\mu-2-d}\right)}{2\mu-2-d}$		
I_2	$\frac{R^{d+2-\mu}-1}{d+2-\mu}$			$\ln R$	$\frac{\left(1 - 1/R^{\mu-2-d}\right)}{\mu-2-d}$	

Tablica 3.1. Wartości całek I_1 (3.21) oraz I_2 (3.27) określających wartość prędkości (3.19), współczynnika dyfuzji (3.20) oraz poziomu saturacji (3.26) w zależności od wykładnika μ . Puste pola w pierwszym wierszu tabeli odpowiadają przedziałom otwartym, których granice wyznaczają pozostałe pola. Dodatkowo, szarą czcionką zaznaczono dodatkowy składnik -1 w liczniku dwóch wyrażeń, który odpowiada wynikowi otrzymanym przez całkowanie (3.22) oraz (3.28) w granicy od 1 do R (nieistotny dla dużych układów).

(ii). *Przypadek 2.* Dla $\mu = d + 2$,

$$(3.29) \quad I_2 = \int_1^R \frac{dr}{r} = \ln R$$

i poziom saturacji rośnie logarytmicznie z liniowym rozmiarem układu, a więc i z liczbą atomów w dowolnym wymiarze.

(iii). *Przypadek 3.* Dla $\mu > d + 2$,

$$(3.30) \quad I_2 = \int_1^R r^{d+1-\mu} dr = \frac{1}{\mu-1-d} \left(1 - \frac{1}{R^{\mu-1-d}} \right).$$

W granicy termodynamicznej całka I_2 jest zbieżna. Poziom saturacji wynosi wtedy

$$(3.31) \quad r_{\text{sat}}^2 = \frac{\pi f_{\infty}(0) \zeta_d d}{\mu-1-d}.$$

Jest on bardzo mały, tym mniejszy im większe μ oraz siła nieporządku dopóki $f_{\infty}(0)$ jest odwrotnie proporcjonalne do szerokości rozkładu.

Całki I_1 oraz I_2 wyznaczają zależność od rozmiaru układu parametrów dynamicznych. Wartości obu całek zostały zebrane w Tabeli 3.1.

C. Czas rozpoczęcia fazy saturacji. Chyba najciekawszym zagadnieniem jest zbadanie czasu t_1 rozpoczęcia saturacji, ponieważ zależy on zarówno od I_1 jak i I_2 , które przyjmują różne wartości w niezbiegających się przedziałach wartości wykładnika μ . Korzystając z warunku

ciągłości,

$$(3.32) \quad t_1 = \frac{I_2}{2I_1}.$$

Rozpatrzę pięć przypadków korzystając z Tabeli 3.1.

(i). *Przypadek 1.* Dla $\mu < d/2 + 1$,

$$(3.33) \quad t_1 = \frac{1}{2} \frac{d+2-2\mu}{d+2-\mu} R^\mu,$$

gdzie dla $\mu = 1$ powyższy wzór jest tożsamy z (3.16).

(ii). *Przypadek 2.* Dla $\mu = d/2 + 1$,

$$(3.34) \quad t_1 = \frac{1}{(d+2)} \frac{R^{d/2+1}}{\ln R}.$$

(iii). *Przypadek 3.* Dla $d/2 + 1 < \mu < d + 2$,

$$(3.35) \quad t_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{d+2-2\mu}{d+2-\mu} \right) \left(\frac{R^{d+2-\mu} - 1}{R^{d+2-2\mu} - 1} \right) \stackrel{R \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{2} \left(\frac{2\mu - d - 2}{d+2-\mu} \right) R^{d+2-\mu}.$$

(iv). *Przypadek 4.* Dla $\mu = d + 2$,

$$(3.36) \quad t_1 = \left(\mu - 1 - \frac{d}{2} \right) \frac{\ln R}{1 - 1/R^{2\mu-2-d}} \stackrel{R \rightarrow \infty}{\approx} \left(\mu - 1 - \frac{d}{2} \right) \ln R.$$

(v). *Przypadek 5.* Ostatecznie, dla $\mu > d + 2$,

$$(3.37) \quad t_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{2\mu - 2 - d}{\mu - 2 - d} \right) \left(\frac{1 - 1/R^{\mu-2-d}}{1 - 1/R^{2\mu-2-d}} \right) \stackrel{R \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{2} \left(\frac{2\mu - 2 - d}{\mu - 2 - d} \right).$$

Dla wyższych wartości wykładnika μ rosnąca zależność czasu t_1 od liniowego rozmiaru układu jest coraz to wolniejsza aż do momentu gdy staje się nieistotna w granicy termodynamicznej dla $\mu > d + 2$.

3.5. Dyskusja

Analityczne formuły, które wyprowadziłem w podrozdziale 3.3 pokrywają się z wynikami numerycznymi w określonych granicach wielkości układu oraz siły nieporządku. Odstępstwo od wzorów analitycznych pojawia się, gdy nieporządek staje się słaby (zob. Rys. 3.6). Jest to oczywiste z powodu załamania się modelu centralnego atomu, którego stosowanie polega na traktowaniu sprzężeń jako małego zaburzenia do części diagonalnych energii, co zakłada istnienie silnego nieporządku. Kolejne odstępstwo pojawia się dla dużego łańcucha atomów (przypadek $d = 1$), co jest widoczne na Rys. 3.5(c,d). Jest to spójne z argumentacją przedstawioną w podrozdziale 2.13 o załamaniu się modelu centralnego atomu dla rosnącego rozmiaru układu. Dodatkowo, w przypadku gdy $\mu < d$, $r_{\text{sat}}^2 \propto R^{d+2-\mu}$, równanie (3.28) (a w szczególnym przypadku $\mu = 1$, zob. równanie (3.15)) przewiduje wzrost dyfuzji poza granice układu, co jest oczywiście niemożliwe w układzie o skończonych rozmiarach. Dlatego trend wzrostu zmienia się dla pewnego granicznego rozmiaru układu (zob. Rys. 3.5). Ten efekt nie jest wychwycony przez model centralnego atomu.

Dynamika korelacji w układzie kwantowym z silnym nieporządkiem oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami

4.1. Wprowadzenie

W niniejszym rozdziale kontynuuję rozważania nad własnościami kwantowego modelu sieciowego z diagonalnym nieporządkiem oraz dalekozasięgowymi sprzężeniami. Jak dotychczas podałem główne własności modelu oraz przybliżone rozwiązanie analityczne dostępne w reżimie silnego nieporządku (rozdział 2). Następnie śledziłem dyfuzję pojedynczej cząstki kwantowej (rozumianej jako wzbudzenie na sieci), posługując się średnim przemieszczeniem kwadratowym (rozdział 3). Teraz pragnę zaprezentować dynamikę rozchodzenia się kwantowej informacji w rozważanym modelu.

W fizyce relatywistycznej informacja nie może rozprzestrzeniać się szybciej niż z prędkością światła $c = 299\,792\,458$ m/s. Maksymalna prędkość zadaje tzw. stożek świetlny, tj. obszar w czasoprzestrzeni, wewnątrz którego może odbywać się ruch. Oznacza to, że informacja przebywająca drogę między punktami oddległymi o r może przebyć ten dystans w czasie nie krótszym niż $t = r/c$.

Nierelatywistyczna teoria kwantowa, w ramach której prowadzone są rozważania mojej Rozprawy, nie narzuca *a priori* żadnego ograniczenia na prędkość propagacji informacji. Pomimo tego Elliott H. Lieb¹ oraz Derek W. Robinson² [38, 39] wykazali, że prędkość rozchodzenia się informacji pomiędzy częściami układu kwantowego może być ograniczona przez oddziaływania o skończonym zasięgu. Ta tzw. granica Lieba-Robinsona została wyznaczona w następujący sposób. Rozważa się normę komutatora operatorów A i B działających na węzłach oddległych o r i w odstępie czasu t , tj. $\|[A_{r_0+r}(t_0+t), B_{r_0}(t_0)]\|$. Przy założeniu, że oddziaływania w układzie zanikają co wykładniczo lub szybciej z odległością, wartość tej normy maleje również wykładniczo dla $t < r/v$. W ten sposób zostaje wyznaczony stożek świetlny, poza którym korelacje z zadany węzłem zanikają bardzo szybko. Skończona, choć zaniedbywalna wartość korelacji poza stożkiem odróżnia kwantowomechaniczny, nierelatywistyczny stożek od stożka znanego z teorii Einsteina. Obecność granicy Lieba-Robinsona była obserwowana w różnych modelach teoretycznych oraz w eksperymencie [40–48]. Pierwsza eksperymentalna obserwacja została dokonana w jednowymiarowym układzie atomów gazu kwantowego spulchakowanych w sieci optycznej [42]. Autorzy skupiają się na ewolucji dwupunktowej funkcji korelacji dla poszczególnych węzłów po wzbudzeniu. Śledzą maksima funkcji korelacji pojawiające się tym później

¹Elliott Hershel Lieb (ur. 31 lipca 1932 r.) — amerykański fizyk, profesor matematyki i fizyki na Uniwersytecie Princeton.

²Derek William Robinson (ur. 25 czerwca 1935 r.; zm. 31 sierpnia 2021 r. — brytyjsko-australijski fizyk teoretyczny i matematyk, profesor na Australijskim Uniwersytecie Narodowym.

w czasie, im dalej od miejsca wzbudzenia znajduje się atom. W ten sposób zostaje wyznaczona maksymalna prędkość propagacji.

Chociaż istnienie granicy Lieba-Robinsona zostało udowodnione dla układów oddziałujących tylko lokalnie, wiele trudu włożono również, aby dowieść istnienia takiej granicy dla układów z oddziaływaniem dalekiego zasięgu, malejącymi z pewną potęgą odległości ($\propto 1/r^\mu$) [45, 46, 49–53]. Jest to o tyle interesujące, o ile w układach o oddziaływaniach dalekiego zasięgu może zachodzić natychmiastowa komunikacja pomiędzy odległymi częściami układu. Nieintuicyjna wydaje się być zatem możliwość występowania tu stożka świetlnego.

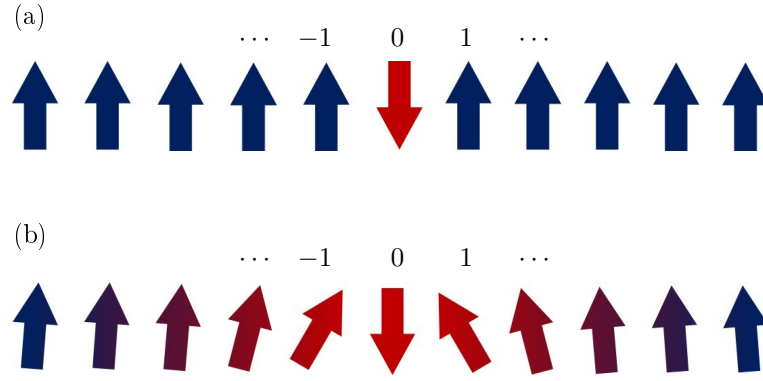
Pierwszy matematyczny dowód istnienia stożka świetlnego w układzie z dalekozasięgowym oddziaływaniem został przedstawiony w [50]. Autorzy pokazują, że w jednowymiarowym układzie z $\mu > 3$, czas potrzebny na skorelowanie odległych atomów rośnie co najwyżej liniowo z odległością. W [49] autorzy podają matematyczny dowód na istnienie stożka świetlnego w d -wymiarowym układzie z dalekozasięgowym oddziaływaniem pod warunkiem, że $\mu > 2d + 1$ (co daje $\mu > 3$ w jednym wymiarze i jest spójne z poprzednimi wynikami). Inne badania [51, 54] wykazują, że warunek na wykładnik oddziaływania może być nawet słabszy np. w przypadku przyjęcia różnych definicji normy operatora w obliczeniach³. Charakter sprzężenia stanowi zatem istotny czynnik wpływający na własności układu. Innym istotnym składnikiem wpływającym na dynamikę wzbudzenia jest doświadczany przez nie nieporządek.

Dlatego w ramach niniejszego rozdziału rozważam rozchodzenie się kwantowych korelacji w jednowymiarowym łańcuchu spinów, pomiędzy którymi występują sprzężenia dalekiego zasięgu $\propto 1/r^\mu$ oraz doświadczające silnego nieporządku w postaci losowego potencjału na węźle. Korelacje określa ilościowo i jakościowo dwupunktowa funkcja korelacji. Pojedyncze wzbudzenie, tj. obrót centralnego spinu w początkowo spolaryzowanym łańcuchu spinów, podróżuje w układzie dzięki sprzężeniom występującym pomiędzy węzłami sieci. Gdy wzbudzenie dociera do kolejnych spinów, następuje wzrost korelacji „na węźle”, tj. pomiędzy centralnym a zadanym spinem. Pokazuję, że funkcja korelacji jest proporcjonalna do kwadratu amplitudy prawdopodobieństwa obrotu spinu na zadanym węźle (czyli do obsadzenia węzła przez kwazicząstkę wzbudzenia), z czego wynika trójfazowy wzrost korelacji na węźle. Najpierw korelacja na określonym węźle rośnie proporcjonalnie do kwadratu czasu. Następnie w pewnej chwili czasu następuje zmiana do wzrostu liniowego w czasie. Ostatecznie następuje wysycenie. Korzystając z przybliżonego rozwiązania analitycznego otrzymanego w rozdziale 2 znajduję analityczną postać funkcji korelacji. Tłumaczę potrójną dynamikę wzrostu korelacji. Określam charakter propagacji korelacji przez śledzenie frontu falowego funkcji korelacji, tj. krzywej w płaszczyźnie $r - t$, dla zadanej wartości korelacji. Na koniec proponuję definicję stożka świetlnego w rozważanym układzie. Wyniki zaprezentowane w tym rozdziale zostały opublikowane w [23].

4.2. Opis układu

Rozważam łańcuch N regularnie rozmieszczonych spinów z jednostkową stałą sieciową ($a = 1$) oraz periodycznymi warunkami brzegowymi (zob. Rys. 4.1). Układ opisywany jest, jak

³Najbardziej naturalny wybór postaci normy operatora $\|A\|$ to jego największa wartość własna, ale można przyjąć inne definicje, dla których graniczna wartość wykładnika μ , powyżej której występuje liniowy stożek w układzie, jest mniejsza niż $2d + 1$. Zobacz definicję normy operatora w [55].



Rys. 4.1. Schematyczny rysunek rozważanego układu — łańcuch jednorodnie rozmieszczonych spinów. W układzie równoległe ustawionych spinów centralny spin zostaje obrócony (a), co pociąga za sobą odpowiedź pozostałych, sprzężonych z nim spinów (b). Kwazicząstka wzbudzenia rozchodzi się w łańcuchu, niosąc ze sobą informację o początkowym wzbudzeniu do odległych węzłów. Dla dalekozasięgowych sprzężeń spodziewane jest natychmiastowe pojawienie się korelacji nawet na odległych węzłach. Źródło: [23].

uprzednio, modelem wprowadzonym w podrozdziale 2.1. Na potrzeby tego rozdziału, wygodne jest korzystanie z postaci hamiltonianu wyrażonego w terminach operatorów spinowych $\sigma_{\pm}^{\alpha}$ oraz σ_i^{α} ($i = x, y, z$), tj. zadanego równaniem (2.6) lub (2.7),

$$(2.6') \quad H = J \left(\sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} \hat{\sigma}_{+}^{\alpha} \hat{\sigma}_{-}^{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta} \hat{\sigma}_{+}^{\alpha} \hat{\sigma}_{-}^{\beta} \right).$$

W rozdziale 3 przyjmowałem normalny rozkład energii ϵ_{α} w numerycznych symulacjach. Teraz bezwymiarowe energie ϵ_{α} będą nieskorelowanymi zmiennymi losowymi pochodzącymi z symetrycznego rozkładu jednorodnego o szerokości W , $\epsilon_{\alpha} \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$. Standardowo przybliżone rozwiązanie analityczne, które rozważam w podrozdziale 4.4 podają zarówno dla jednostajnego jak i normalnego rozkładu energii na węźle.

Ponieważ łańcuch spinów jest układem jednowymiarowym, dalekozasięgowe sprzężenia (2.2) przyjmują prostszą formę,

$$(4.1) \quad V_{\alpha\beta} = \begin{cases} \frac{1}{|\alpha - \beta|^{\mu}} & \text{dla } \alpha \neq \beta, \\ 0 & \text{dla } \alpha = \beta, \end{cases}$$

gdzie $|\alpha - \beta|$ jest odległością pomiędzy spinami α i β .

Początkowo układ jest w stanie całkowicie spolaryzowanym, tj. wszystkie spiny są zwrócone ku górze (zob. Rys. 4.1 oraz równanie (2.2)). Pomiędzy równoległymi spinami nie występują korelacje. Centralny⁴ spin ($\alpha = 0$) zostaje następnie obrócony (ang. *local quench*). Sprzężenie pomiędzy węzłami prowadzi do rozprzestrzeniania się wzbudzenia spinowego w układzie.

⁴W przypadku okresowych warunków brzegowych nie ma jednego wyróżnionego centralnego spinu, inaczej: każdy spin może pełnić rolę „centralnego”.

Informacja o początkowym wzbudzeniu niesiona jest do odległych spinów. Korelację pomiędzy spinem α a spinem centralnym określa ilościowo dwupunktowa funkcja korelacji, która może być mierzona w eksperymentach [42],

$$(4.2) \quad C_\alpha(t) = \left\langle \langle \hat{\sigma}_z^\alpha(t) \hat{\sigma}_z^0(t) \rangle - \langle \hat{\sigma}_z^\alpha(t) \rangle \langle \hat{\sigma}_z^0(t) \rangle \right\rangle_{\text{dis.}},$$

gdzie $\langle \dots \rangle_{\text{dis}}$ oznacza średnią po realizacjach nieporządku, natomiast $\langle \dots \rangle$ jest średnią kwantowo-mechaniczną, która wyraża się przez

$$(4.3a) \quad \langle A(t) \rangle = \langle \Psi(t) | A(0) | \Psi(t) \rangle \quad \text{w obrazie Schrödingera},$$

$$(4.3b) \quad \langle A(t) \rangle = \langle \Psi(0) | A(t) | \Psi(0) \rangle \quad \text{w obrazie Heisenberga},$$

dla pewnego operatora A , gdzie $A(t) = e^{+iHt} A(0) e^{-iHt}$. Stan układu, w którym porusza się tylko jedno wzbudzenie, zadany jest przez (2.4) oraz (2.5). Pokażę teraz, że funkcja korelacji wyraża się w prosty sposób przez obsadzenia węzła o numerze α oraz węzła centralnego. Operator $\hat{\sigma}_\alpha^z$ działa na stan z bazy stanów zlokalizowanych na węźle $\{|\beta\rangle\}$ w następujący sposób

$$(4.4) \quad \hat{\sigma}_\alpha^z |\beta\rangle = \begin{cases} -|\beta\rangle & \text{for } \alpha = \beta, \\ +|\beta\rangle & \text{for } \alpha \neq \beta. \end{cases}$$

Korzystając z równań (4.2), (4.4), (2.4), (2.5) oraz licząc średnią kwantowomechaniczną (4.3a) w obrazie Schrödingera dostaje się wyrażenie na funkcję korelacji wyrażoną przez obsadzenia węzłów,

$$(4.5) \quad C_\alpha(t) = \begin{cases} \langle 4|c_0(t)|^2 |c_\alpha(t)|^2 \rangle_{\text{dis.}} & \text{dla } \alpha \neq 0, \\ -\langle 4|c_0(t)|^2 (1 - |c_0(t)|^2) \rangle_{\text{dis.}} & \text{dla } \alpha = 0. \end{cases}$$

Wyraźnie widać, że w obrazie jednocząstkowym dwupunktowa funkcja korelacji wyraża się wyłącznie poprzez obsadzenie centralnego węzła oraz węzła, do którego dociera korelacja.

W następnym podrozdziale prezentuję wyniki symulacji numerycznych. Korzystając z (4.5), obliczam funkcję korelacji poprzez znalezienie obsadzeń $|c_\alpha|^2$. Obsadzenia, tak jak w (3.3), znajduję przez dokładną numeryczną diagonalizację hamiltonianu (2.6). Wynik zostaje uśredniony po $N_{\text{rep}} = 2.5 \cdot 10^7$ realizacjach nieporządku. Skorzystałem przy tym z periodyczności układu otrzymując N realizacji nieporządku z jednej diagonalizacji przed N -krotny wybór „centralnego” spinu. Nie było to jednak możliwe przy symulacjach modelu centralnego atomu, w których wykonałem $N_{\text{rep}} = 5 \cdot 10^5$ realizacji nieporządku.

Dynamikę obsadzeń w rozważanym modelu podałem już w rozdziale 2. Pozwoli ona na przybliżone określenie dynamiki korelacji w reżimie silnego nieporządku w podrozdziale 4.4.

Alternatywnie do funkcji korelacji rozchodzenie się informacji kwantowej w układzie można opisywać entropią splątania jednego ze spinów z resztą łańcucha, co pokazuję w podrozdziale 4.7.

4.3. Wyniki symulacji numerycznych

W tym podrozdziale prezentuję wyniki otrzymane przez numeryczne rozwiązanie modelu opisanego w podrozdziale 4.2.

A. Ewolucja czasowa korelacji . Rys. 4.2(a-c) przedstawia mapę korelacji dla układu $N = 1001$ spinów o sile nieporządku energii $W = 200$ jako funkcję czasu dla wybranych wartości wykładnika μ . Można zauważyć, że korelacje narastają w czasie i w pewnej chwili wysycają się, jednak tym później im dalej od centralnego atomu znajduje się dany węzeł. Nie obserwuje się spadku korelacji dla odległych czasów, lecz utrzymują się one na osiągniętym poziomie. Znając dynamikę korelacji dla poszczególnych spinów, mogłem znaleźć front propagacji, tj. krzywą w płaszczyźnie $\alpha - t$ dla zadanej wartości korelacji $\tilde{C}$. Fronty propagacji są naszkicowane przerywaną linią na Rys. 4.2(a-c) oraz przedstawione na Rys. 4.2(d-f), gdzie widać ich potęgowy charakter (proste linie na wykresie w skali podwójnie logarytmicznej). W pewnym momencie potęgowy trend linii frontu zmienia się na inny trend potęgowy, ale o mniejszym wykładniku (zob. Rys. 4.2(d-f)).

Wybór wartości $\tilde{C}$ jest znacznie ograniczony, gdyż aby pokryć cały zakres dobranych parametrów symulacji (czas ewolucji oraz rozmiar układu), musi być ona zarówno mniejsza od minimalnej wartości $C_\alpha(t)$ (dla spinów odległych od centrum, $\alpha \gg 1$) jak i większa od maksymalnej wartości dla początkowego czasu (dla spinów bliskich centrum $\alpha \gtrsim 1$). Dlatego istnieje bardzo wąski przedział $\tilde{C}$, dla którego jest to spełnione. Dodatkowo gdy wykładnik μ wzrasta, maleje zasięg sprzężenia i układ staje się coraz słabiej skorelowany. Dobrze dopasowane wartości $\tilde{C}$ przesuwają się w stronę bardzo małej wartości, która dla $\mu = 3$ wynosi $\tilde{C} = 10^{-14}$ (zob. Fig. 4.2(c,f)).

Chociaż śledzenie frontu korelacji niesie istotną informację na temat ewolucji, nie wyznacza jednak jednoznacznie stożka świetlnego, tak jak został on zdefiniowany we Wprowadzeniu do tego rozdziału (szybki spadek korelacji poza stożkiem). Bardziej odpowiednią metodę do określenia stożka przedstawiam w podrozdziale 4.4 dotyczącym analitycznego rozwiązania modelu.

Aby zrozumieć dynamikę korelacji na Rys. 4.2(g-i) przedstawiłem zależność czasową korelacji dla kilku wybranych węzłów $\alpha = 0, 1, 4, 16, 64, 256, 500$. W reżimie silnego nieporządku wzrost korelacji następuje jakościowo w taki sam sposób dla każdego spinu. Obserwuje się trzy fazy dynamiki.

Najpierw korelacje rosną wraz z kwadratem czasu,

$$(4.6) \quad C_\alpha(t) = A_\alpha t^2 \quad \text{dla} \quad t < t_0,$$

gdzie A_α jest zależnym od numeru węzła (tj. odległości od centrum) współczynnikiem proporcjonalności.

Następnie w pewnej chwili czasu t_0 , zależność czasowa zmienia się w funkcję liniową,

$$(4.7) \quad C_\alpha(t) = B_\alpha t \quad \text{dla} \quad t_0 < t < t_1^{(\alpha)},$$

ze współczynnikiem kierunkowym B_α . Na koniec, dla $t \geq t_1^{(\alpha)}$, korelator osiąga stałą wartość (wysycą się),

$$(4.8) \quad C_\alpha(t) = C_\alpha^\infty \quad \text{dla} \quad t_1^{(\alpha)} < t.$$

Jako że wymaga się, aby $C_\alpha(t)$ było funkcją ciągłą w czasie można znaleźć chwile przejścia pomiędzy fazami,

$$(4.9) \quad t_0 = B_\alpha / A_\alpha$$

oraz

$$(4.10) \quad t_1^{(\alpha)} = C_\alpha^\infty / B_\alpha.$$

Znalazłem parametry dynamiczne przez dopasowanie odpowiednich funkcji potęgowych do następujących po sobie reżimów dynamiki (4.6-4.8). Parametry A_α , B_α oraz C_α^∞ są funkcjami potęgowymi odległości $|\alpha|$ z całkowitymi bądź wymiernymi wykładnikami. Zarówno A_α jak i B_α są odwrotnie proporcjonalne do $|\alpha|^{2\mu}$, (zob. Rys. 4.3(a,b)). Czas pierwszego przejścia t_0 jest niezależny od odległości [Rys. 4.3(d)]. Poziom wysycenia maleje z odległością jak $1/|\alpha|^\mu$ [Rys. 4.3(c)], natomiast drugi czas graniczny t_1 rośnie z rozmiarem układu jak $|\alpha|^\mu$ [Rys. 4.3(e)].

4.4. Przybliżone rozwiązanie analityczne

W tym podrozdziale podaję przybliżone rozwiązanie analityczne dla funkcji korelacji w jej trzech fazach. Korzystam tu z wyników otrzymanych w rozdziale 2. Chociaż symulacje zostały wykonane dla jednorodnego rozkładu energii [$\epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$], wyprowadzam formuły również dla rozkładu normalnego energii na węźle o odchyleniu standardowym σ [$\epsilon_\alpha \in \mathcal{N}(0, \sigma)$]. Jak długo nieporządek jest silny, słuszne pozostaje przybliżenie centralnego atomu, a obsadzenia dane są równaniami (2.100), (2.101) oraz (2.105). Obsadzenie centralnego węzła, które występuje we wzorze (4.5) w reżimie silnego nieporządku jest bliskie jedności (zob. podrozdział 2.7). W celu uproszczenia (4.5) przybliżam $|c_0(t)|^2 \simeq 1$ i otrzymuję

$$(4.11) \quad C_\alpha(t) = 4 \langle |c_\alpha(t)|^2 \rangle \quad \text{dla} \quad \alpha \neq 0.$$

W prosty sposób mogę teraz dostać wzory na $C_\alpha(t)$ w każdej z faz ewolucji.

A. Pierwsza faza ruchu. Wstawiając (2.100) do (4.11) dostaje się

$$(4.12) \quad C_\alpha(t) = \frac{4t^2}{|\alpha|^{2\mu}} \quad \text{dla} \quad t < t_0,$$

co oznacza, że pierwszy parametr dynamiczny

$$(4.13) \quad A_\alpha = \frac{4}{|\alpha|^{2\mu}}$$

niezależnie od wybranego rozkładu prawdopodobieństwa energii. Na Rys. 4.3(a) powyższą formułę zaznaczyłem przerywaną linią. Widać, że doskonale dopasowuje się ona do wyników symulacji.

B. Druga faza ruchu. Dalej, korzystając z równania (2.101) otrzymuje się funkcję korelacji w drugiej fazie (liniowej w czasie),

$$(4.14) \quad C_\alpha(t) = \frac{8\pi f_\infty(0)}{|\alpha|^{2\mu}} t \quad \text{dla} \quad t_0 < t < t_1^{(\alpha)}.$$

Drugi parametr dynamiczny wynosi

$$(4.15) \quad B_\alpha = \begin{cases} \frac{8\pi}{W|\alpha|^{2\mu}} & \text{dla} \quad \epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \\ \frac{4\sqrt{\pi}}{\sigma|\alpha|^{2\mu}} & \text{dla} \quad \epsilon_\alpha \in \mathcal{N}(0, \sigma). \end{cases}$$

Pierwszy czas przejścia wyrażony jest dokładnie równaniem (2.102), tj. ma postać

$$(4.16) \quad t_0 = \begin{cases} \frac{2\pi}{W} & \text{dla } \epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \\ \frac{\sqrt{\pi}}{\sigma} & \text{dla } \epsilon_\alpha \in \mathcal{N}(0, \sigma). \end{cases}$$

C. Trzecia faza ruchu (wysycenie). Na koniec korzystając z równania (2.105), znajduję poziom, na którym wysycza się funkcja korelacji dla zadanej wartości α ,

$$(4.17) \quad C_\alpha^\infty = \begin{cases} \frac{4\pi}{W|\alpha|^\mu} & \text{dla } \epsilon_\alpha \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \\ \frac{2\sqrt{\pi}}{\sigma|\alpha|^\mu} & \text{dla } \epsilon_\alpha \in \mathcal{N}(-W/2, W/2) \end{cases}$$

Czas rozpoczęcia się fazy saturacji jest tożsamy z (2.106), tj.

$$(2.106') \quad t_1^{(\alpha)} = \frac{|\alpha|^\mu}{2}.$$

Na Rys. 4.3(c,e) dla dużych wartości $|\alpha|$ zauważalne jest pojawienie się szumu na początkowo gładkiej zależności poziomu wysycenia lub czasu t_1 od numeru węzła. Jest on spowodowany niewystarczającą liczbą realizacji nieporządku w symulacjach. Z prostego argumentu zliczania rezonansów znajduję, że dla układu o $N = 1001$ węzłach, $W = 200$ oraz $\mu = 3.5$, liczba realizacji nieporządku potrzebna, aby chociaż jeden odległy węzeł znalazł się w rezonansie z węzłem centralnym jest rzędu $N_{\text{rep}} \sim 10^{11}$, jako że prawdopodobieństwo rezonansu wynosi w przybliżeniu $V_{\alpha 0}/W$.

4.5. Szybkość propagacji — wyznaczenie stożka świetlnego

W tym podrozdziale wyznaczam prędkość propagacji frontu falowego, korzystając ze wzorów analitycznych wyprowadzonych w podrozdziale poprzednim. Front falowy korelacji jest zdefiniowany przez krzywą w płaszczyźnie $\alpha - t$ dla której $C_\alpha(t) = \tilde{C}$. Badam ten front dla zadanej wartości korelacji $\tilde{C}$, która jest osiągana przez spin α czasie $t_{\tilde{C}}(|\alpha|)$. Wyznaczam $t_{\tilde{C}}$ w funkcji numeru węzła, by następnie znaleźć relację odwrotną $|\alpha(t_{\tilde{C}})|$. Będzie ona miała inną postać w zależności od tego, czy $\tilde{C}$ znajduje się w pierwszej, czy drugiej fazie ruchu. Na koniec prowadzę rozważania nad brakiem bądź obecnością stożka świetlnego w badanym modelu.

A. Pierwsza faza ruchu. Jeśli $\tilde{C}$ znajduje się w pierwszej fazie [równanie (4.6)], czas potrzebny do osiągnięcia zadanej korelacji wynosi

$$(4.18) \quad t_{\tilde{C}} = \frac{\sqrt{\tilde{C}}}{2} |\alpha|^\mu.$$

Musi być on mniejszy od t_0 , wyznaczonego w równaniu (2.102). Propagację w pierwszej fazie ruchu określa relacja odwrotna

$$(4.19) \quad |\alpha(t)| = \left(\frac{2t}{\sqrt{\tilde{C}}} \right)^{1/\mu}.$$

B. Druga faza ruchu. Gdy $\tilde{C}$ znajduje się w drugiej fazie ruchu [równanie (4.7)], czas potrzebny na osiągnięcie zadanej korelacji wynosi

$$(4.20) \quad t_{\tilde{C}} = \begin{cases} \frac{W\tilde{C}}{8\pi} |\alpha|^{2\mu} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \\ \frac{\sigma\tilde{C}}{4\sqrt{\pi}} |\alpha|^{2\mu} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{N}(0, \sigma). \end{cases}$$

Musi być on większy od t_0 a mniejszy do t_1 . Propagacja dana jest przez

$$(4.21) \quad |\alpha(t)| = \begin{cases} \left(\frac{8\pi t}{W\tilde{C}} \right)^{1/(2\mu)} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{U}(-W/2, W/2), \\ \left(\frac{4\sqrt{\pi}}{\sigma\tilde{C}} \right)^{1/(2\mu)} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{N}(0, \sigma). \end{cases}$$

Potęgowe zależności (4.18) oraz (4.20) zostały naszkicowane przerywanymi liniami na Rys. 4.2(d-f) i w sposób doskonały dopasowują się do danych numerycznych. Zmiana trendu propagacji następuje dla pewnego $\alpha_0 = \alpha(t_0)$ równego

$$(4.22) \quad \alpha_0 = \begin{cases} \left(\frac{4\pi}{W\sqrt{\tilde{C}}} \right)^{1/\mu} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{U}(-W/2, W/2) \\ \left(\frac{2\sqrt{\pi}}{\sigma\sqrt{\tilde{C}}} \right)^{1/\mu} & \text{dla } \epsilon_{\alpha} \in \mathcal{N}(0, \sigma). \end{cases}$$

C. Stożek świetlny. Wyniki pokazują, że propagacja korelacji nigdy nie będzie wyłącznie balistyczna ($|\alpha| \propto t$), tj. o stałej w czasie prędkości rozchodzenia się korelacji. I choć dla $\mu = 1$ korelacje propagują najpierw balistycznie, to po czasie t_0 zaczynają rozprzestrzeniać się dyfuzyjnie ($|\alpha| \propto t^{1/2}$). Z drugiej strony, początkowa superdyfuzja dla $\mu = 1/2$ przechodzi po czasie t_0 w dyfuzję balistyczną.

Określenie frontu falowego niesie ze sobą istotną informację o propagacji korelacji. Nie stanowi jednak dobrej definicji stożka świetlnego, gdyż nie zadaje granicy obszaru, poza którym korelacje maleją znacznie szybciej niż wewnątrz stożka (zob. Wprowadzenie do niniejszego rozdziału). Z postaci frontu falowego nie można zatem wyrokować o granicy Lieba-Robinsona. Zaproponuję teraz bardziej adekwatną definicję stożka w badanym przeze mnie układzie. Korelacje maleją wzdłuż łańcucha potęgowo z odległością. Można jednak wyróżnić dwa trendy spadku. W obszarze wysycenia korelacje maleją wolniej niż w poprzedzających ją fazach (por. równania (4.12), (4.14), (4.17) oraz Rys. 4.3(a-c)). Wydaje się zatem naturalnym, aby odgraniczyć te dwa obszary na płaszczyźnie czasu i odległości i zdefiniować stożek świetlny jako granicę pomiędzy nimi. W tak zdefiniowanym stożku, korelacje poza stożkiem maleją znacznie szybciej niż wewnątrz niego. Równanie stożka otrzymuje się jako odwrotną do (2.106') określającą czas t_1 w funkcji odległości, tj.

$$(4.23) \quad \alpha(t) = (2t)^{1/\mu}.$$

Powyższy wzór pozwala wyznaczyć prędkość rozchodzenia się korelacji. W szczególnym przypadku $\mu = 1$ jest ona stała i wynosi $2(2Ja/\hbar$ w jednostkach fizycznych, gdzie a jest stałą sieciową). Faza wysycenia, w której korelacje maleją wolniej niż poza nią, zostaje osiągnięta w czasie wprost proporcjonalnym do odległości od centrum. Dla $\mu > 1$ prędkość rozchodzenia się informacji jest zawsze malejącą, potęgową funkcją czasu.

4.6. Granica słabego nieporządku i braku nieporządku

Jako pierwsze uzupełnienie do powyższych rozważań, w tym podrozdziale zajmuję się dynamiką korelacji w układzie o słabym nieporządku oraz w granicznym przypadku układu wolnego od nieporządku.

Na Rys. 4.4 przedstawiam wyniki numerycznych symulacji dla układu z niewielkim nieporządkiem ($W = 2.0, 0.2$) oraz wolnego od nieporządku ($W = 0$). Na panelach (g)-(f) można dostrzec, że ewolucja przebiega teraz w dwóch następujących po sobie etapach, tj. kwadratowej w czasie, a następnie od razu wysycenia, czyli z pominięciem środkowej fazy (liniowej w czasie) obecnej jedynie w układach o silnym nieporządku. Początkowy kwadratowy wzrost w czasie występuje także w układzie wolnym od nieporządku (panel (h)). Jest to fundamentalna własność modeli z oddziaływaniem typu $1/r^\mu$, co można także pokazać, korzystając z krótkoczasowego rachunku zaburzeń (zob. np. [37]). Nieobecność środkowej fazy można wytłumaczyć przez odniesienie się do wzoru (4.16) określającego czas t_0 rozpoczęcia się środkowej fazy. Jest on odwrotnie proporcjonalny do wielkości nieporządku. Dla niewielkich wartości W przekracza on czas $t_1^{(\alpha)}$ rozpoczęcia trzeciej fazy, tak że ewolucja zdąży wysycić się w czasie krótszym niż t_0 .

Dla układu wolnego od nieporządku dynamika układu dąży do jednorodnego rozłożenia obsadzeń na węzłach, tj. $|c_\alpha(\infty)|^2 = 1/N$, dla każdego α . Funkcja korelacji (4.5) przyjmuje postać

$$(4.24) \quad C_\alpha(t \rightarrow \infty) = \begin{cases} \frac{4}{N^2}, & \text{dla } \alpha \neq 0, \\ -\frac{4}{N} \left(1 - \frac{1}{N}\right), & \text{dla } \alpha = 0. \end{cases}$$

Powyższe oszacowanie zostało zaznaczone na Rys. 4.4(h,i) czarnymi kropkowanymi liniami. Jednakże nawet dla niewielkiego nieporządku $W = 0.2$ oraz $\mu = 1$ korelacje wciąż znacząco odbiegają od powyższych formuł. Odbiegają jednak także od wyników pochodzących z modelu centralnego atomu narysowanymi linią przerywaną (zob. Rys. 4.4(h)). Wraz ze zmniejszaniem się siły nieporządku, poziom saturacji zbiega do (4.24), natomiast coraz bardziej odbiega od wyników modelu centralnego. Znajduję również czas $t_2^{(\alpha)}$ rozpoczęcia fazy wysycenia w układzie wolnym od nieporządku,

$$(4.25) \quad t_2^{(\alpha)} = \frac{|\alpha|^{2\mu}}{N^2}$$

który rośnie szybciej z odległością niż $t_1^{(\alpha)}$ w silnie niejednorodnym układzie, ale nie oznacza to, że go przekracza, zwłaszcza dla $\mu < 2$, gdzie maksymalny czas $t_1^{(\alpha)}$ rośnie szybciej z rozmiarem układu od $t_2^{(\alpha)}$.

4.7. Równoważne podejście: entropia splątania

Jako kolejne uzupełnienie do wcześniejszych podrozdziałów pokazuję tutaj, że propagację korelacji można rozważać, nie tylko badając dwupunktową funkcję korelacji, ale również w kategoriach entropii von Neumanna, która jest miarą informacji kwantowej. Należy znaleźć stopień splątania pomiędzy pewnym węzłem α a resztą układu, korzystając z entropii von Neumanna

$$(4.26) \quad S = -\text{Tr } \rho \ln \rho,$$

gdzie $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ jest macierzą gęstości układu a stan układu $|\Psi\rangle$ jest zadany przez równanie (2.4) oraz (2.5). W celu znalezienia splątania pojedynczego węzła z resztą łańcucha przeprowadzam najpierw dekompozycję Schmidta stanu $|\Psi\rangle$,

$$(4.27) \quad \begin{aligned} |\Psi\rangle &= c_\alpha(t) |\uparrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} \otimes |\downarrow\rangle_\alpha + \sum_{\beta \neq \alpha} c_\beta(t) |\uparrow \dots \downarrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} \otimes |\uparrow\rangle_\alpha \\ &= c_\alpha(t) |\uparrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} \otimes |\downarrow\rangle_\alpha \\ &\quad + \sqrt{1 - |c_\alpha(t)|^2} \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{c_\beta(t)}{\sqrt{1 - |c_\alpha(t)|^2}} |\uparrow \dots \downarrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} \otimes |\uparrow\rangle_\alpha, \end{aligned}$$

gdzie

$$|\uparrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} = \bigotimes_{\beta \neq \alpha} |\uparrow\rangle_\beta$$

oraz

$$|\uparrow \dots \downarrow \dots \uparrow\rangle_{\beta \neq \alpha} = \bigotimes_{\gamma \neq \alpha, \beta} |\uparrow\rangle_\gamma \otimes |\downarrow\rangle_\beta.$$

W drugim członie w (4.27) wyciągnąłem czynnik $\sqrt{1 - |c_\alpha(t)|^2}$ przed sumę, aby zapewnić unormowanie współczynników Schmidta, które wynoszą odpowiednio $c_\alpha(t)$ dla podsystemu będącego pojedynczym spinem α oraz $\sqrt{1 - |c_\alpha(t)|^2}$ dla reszty łańcucha. Ostatecznie entropia von Neumanna przybiera postać

$$(4.28) \quad \begin{aligned} S_\alpha(t) &= - (1 - |c_\alpha(t)|^2) \ln(1 - |c_\alpha(t)|^2) - |c_\alpha(t)|^2 \ln(|c_\alpha(t)|^2) \\ &\approx |c_\alpha(t)|^2, \end{aligned}$$

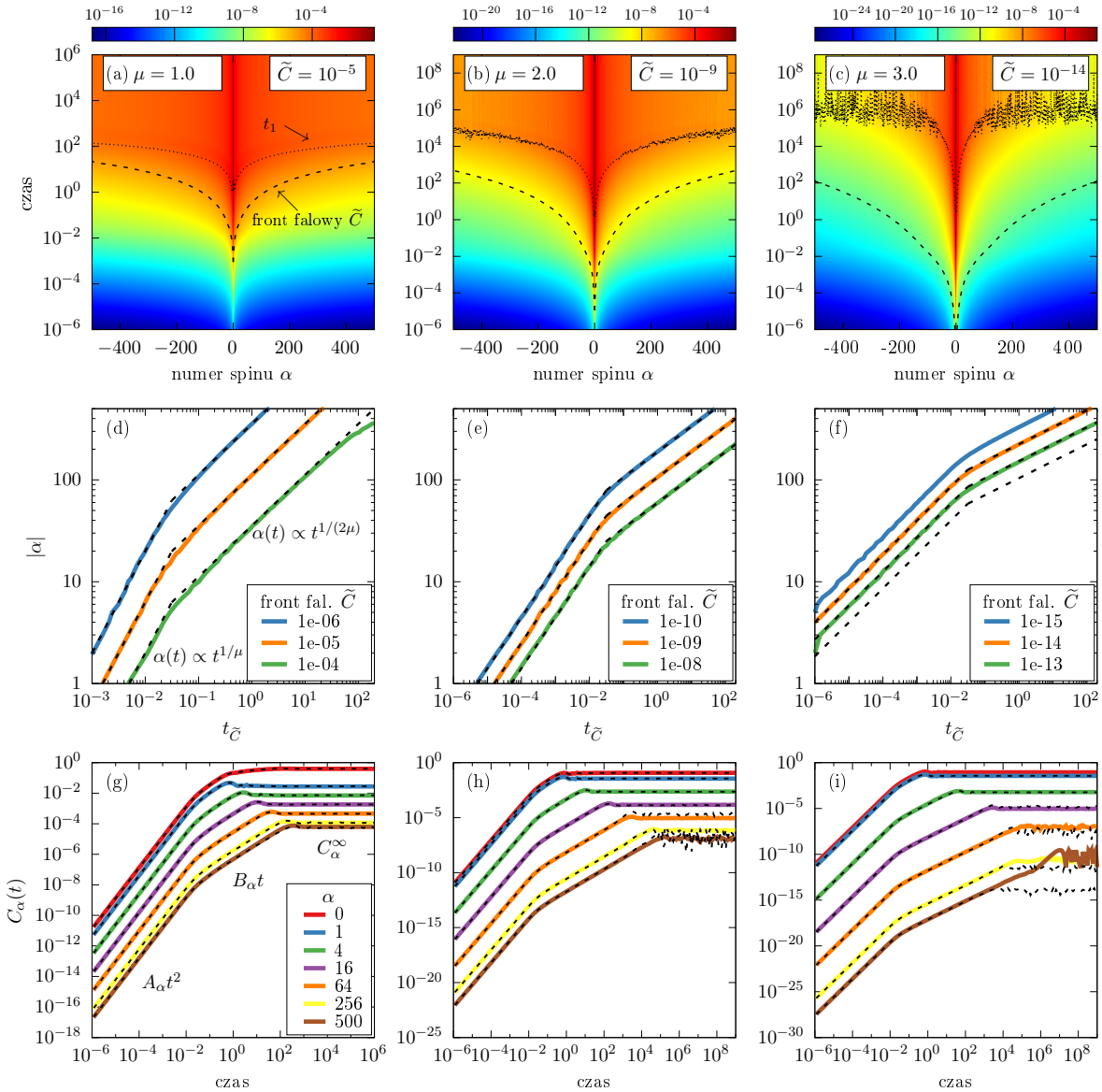
gdzie ostatnie przybliżenie jest słuszne w reżimie silnego nieporządku i dla $\alpha \neq 0$. Otrzymana entropia von Neumanna określa ilościowo splątanie węzła o numerze α z resztą układu. Zależy ona wyłącznie od obsadzenia danego węzła, podobnie jak funkcja korelacji w (4.11). Spodziewane jest zatem jakościowo identyczne zachowanie się $S_\alpha(t)$ i $C_\alpha(t)$.

Istotnie, Rys. 4.5 pokazuje, że obliczona numerycznie entropia odtwarza jakościowo te same efekty, co funkcja korelacji (por. Rys. 4.2). Wzrost entropii na węźle przebiega w trzech fazach czasowych, kwadratowej w czasie, liniowej i wysycenia. Logarytmiczna zależność entropii od obsadzenia węzła nie wpływa znacząco na potęgowe zależności czasowe $S_\alpha(t)$ jeśli nieporządek jest duży [Fig. 4.5(g-f)]. Korzystając z modelu centralnego atomu, można przeprowadzić rozumowanie podobne do tego w podrozdziałach 4.4 i 4.5. W istocie, w granicy wysokiego nieporządku jedyna różnica pomiędzy $C_\alpha(t)$ i $S_\alpha(t)$ bierze się z czynnika „4” w równaniu (4.11) [porównaj z równaniem (4.28)].

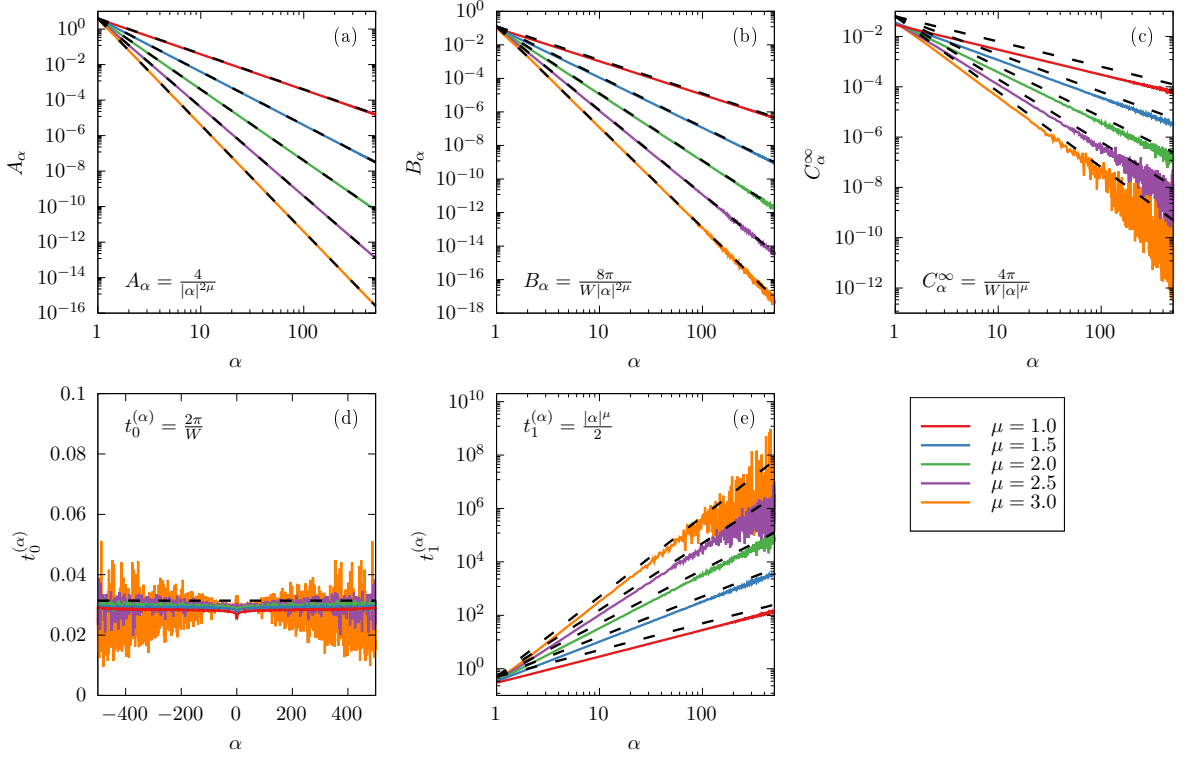
4.8. Dyskusja

Propagacja korelacji obliczona w podrozdziale 4.5 zmienia się w zależności od tego, czy zadana wartość korelacji znajduje się w pierwszej, czy w drugiej fazie korelacji. Charakter propagacji zmienia się po czasie t_0 , kiedy to następuje zmiana fazy ruchu. Jest to widoczne na Rys. 4.2(d-f), gdzie narysowałem czas potrzebny do osiągnięcia zadanej wartości korelacji w zależności od odległości od centrum łańcucha.

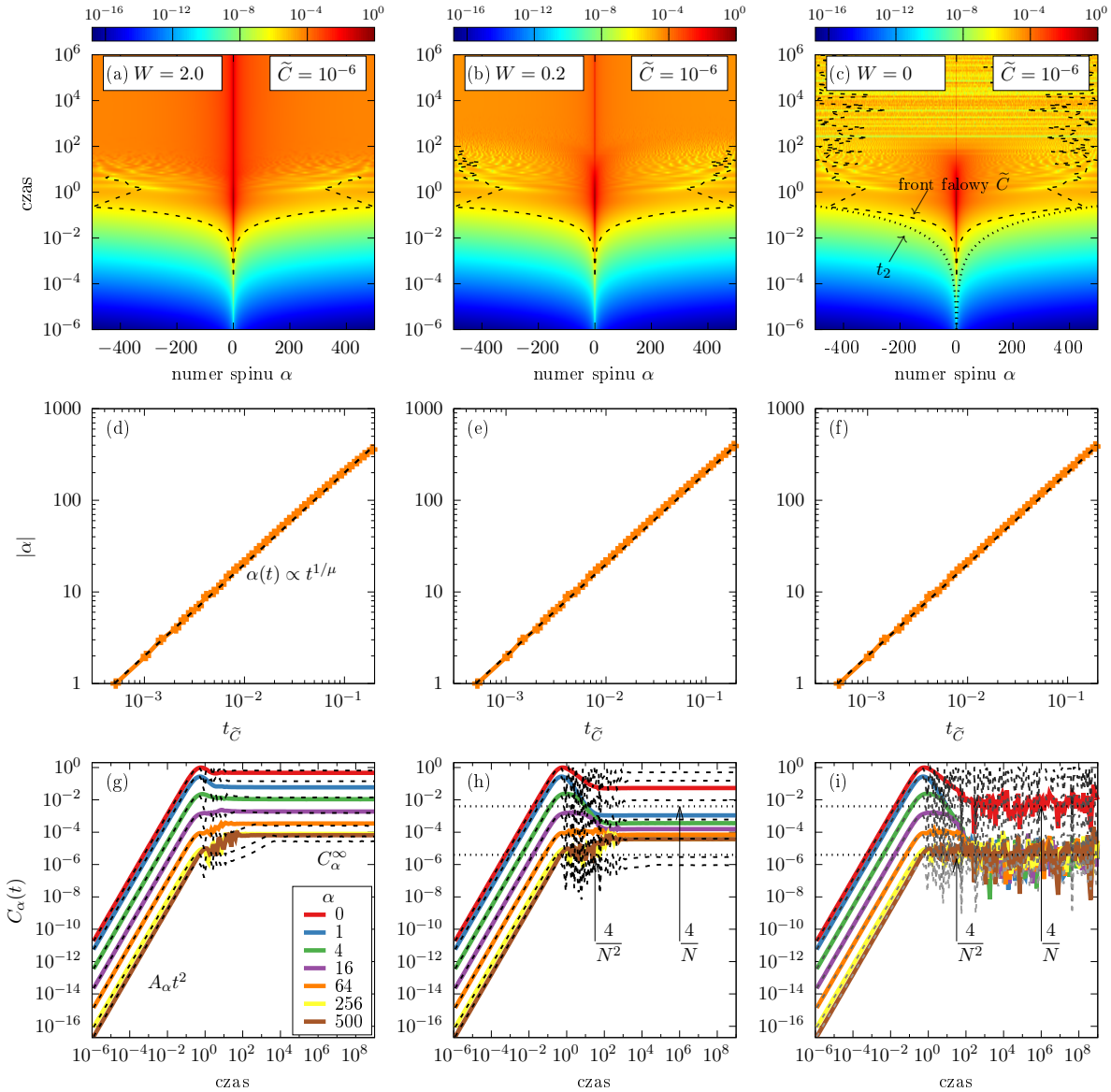
W szczególnym przypadku $\mu = 1$ propagacja zaczyna się od ruchu balistycznego ($\alpha(t) \propto t$), a następnie zmienia się w standardową dyfuzję ($\alpha(t) \propto \sqrt{t}$). Dla wyższych wartości μ pierwsza faza ruchu pozostaje zawsze subbalistyczna (dla $\mu > 2$ subdyfuzyjna), natomiast druga faza propagacji jest zawsze subdyfuzją. Można tutaj zadać również pytanie o wpływ skończonego rozmiaru układu na dynamikę korelacji. Poziom wysycenia korelacji (a więc i obsadzenie węzłów) maleje jak $1/r$ dla $\mu = 1$. W granicy termodynamicznej suma obsadzeń jest zatem rozbieżna i można oczekiwać, że model załamuje się dla pewnego (dużego) rozmiaru układu. Niemniej jednak należy zauważyć, że czas rozpoczęcia fazy wysycenia rośnie proporcjonalnie z rozmiarem układu $t_1 \propto r$. Nieskończony czas t_1 w granicy termodynamicznej implikuje, że wzrost korelacji utrzymuje się w drugiej fazie ewolucji [Eq. (4.7)]. Oznacza to rozkład obsadzeń wzdłuż węzła malejący jak $1/r^2$, co zapewnia dobrą zbieżność sumy obsadzeń.



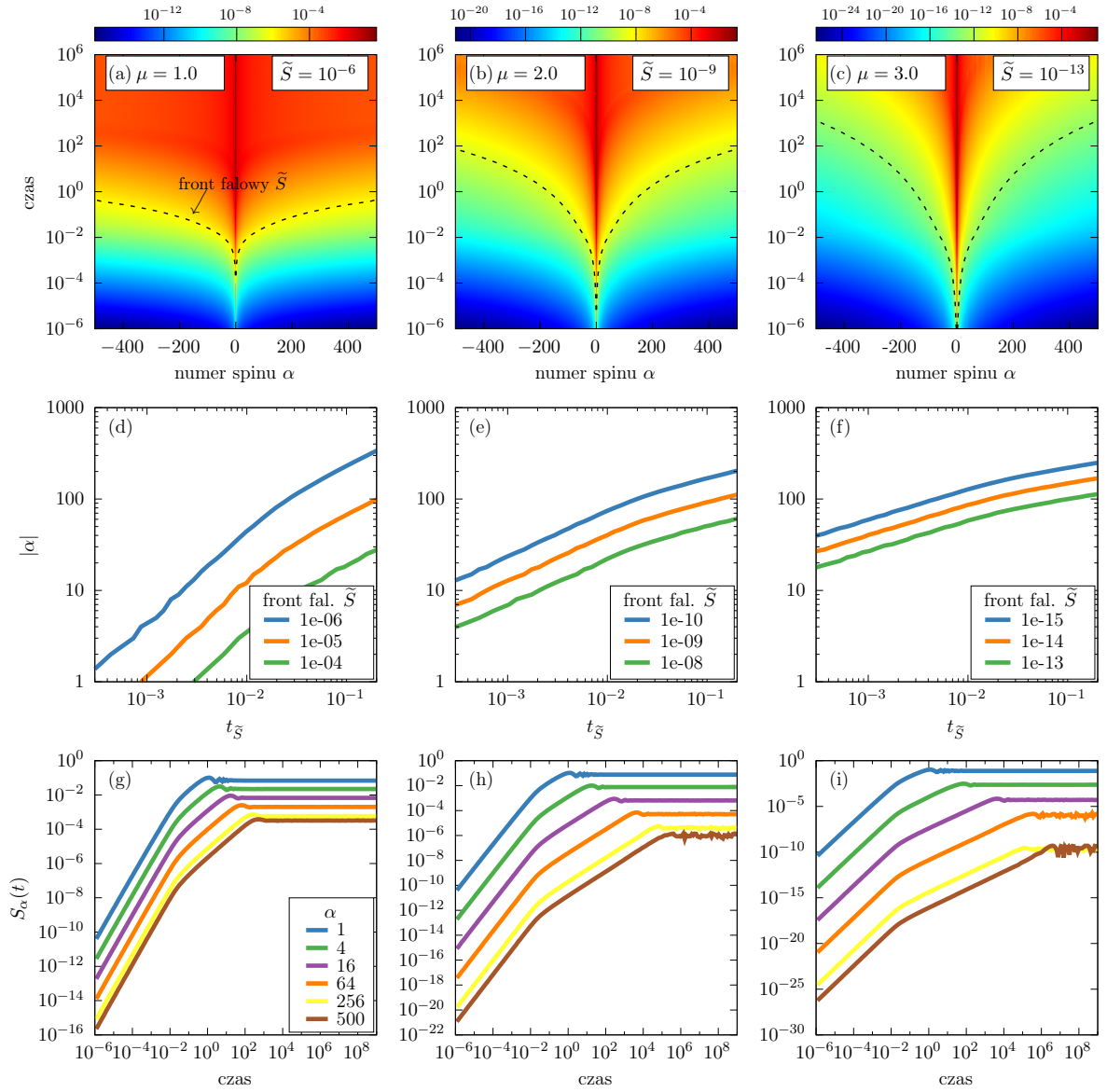
Rys. 4.2. (a-c) Mapa czasowej ewolucji wartości bezwzględnej funkcji korelacji $|C_\alpha(t)|$ (zob. równanie (4.2)) dla każdego spinu w łańcuchu. Kolor odpowiada wartościom funkcji korelacji jako funkcji numeru węzła oraz czasu dla trzech różnych zasięgów oddziaływania zadanych przez wykładnik $\mu = 1.0, 2.0, 3.0$. Linia kropkowaną zakresłono obszar stożka świetlnego danego przez czas t_1 (zob. Rys. 4.3(e) oraz równanie (2.106')). Dodatkowo przerywanymi liniami zaznaczono fronty propagacji (po jednym na każdym z rysunków), tj. zależność $t_{\tilde{C}}(|\alpha|)$ dla wybranych wartości korelacji $C_\alpha(t) = \tilde{C}$, podanej w prawym górnym rogu każdego z rysunków. (d-f) Fronty falowe narysowane w skali podwójnie logarytmicznej dla trzech różnych wartości $\tilde{C}$. Oś została obrócona względem (a-c) dla lepszego przedstawienia trendu propagacji. Przerywanymi liniami zaznaczono analityczne formuły (4.19) oraz (4.21) otrzymane z wykorzystaniem modelu centralnego atomu. (g-i) $|C_\alpha(t)|$ w funkcji czasu dla wybranych atomów $\alpha = 0, 1, 4, 16, 64, 256, 500$. Widoczna jest potrójna dynamika ewolucji $t^2 \rightarrow t \rightarrow \text{const.}$ (zob. podrozdział 4.3). Wyniki otrzymane z symulacji modelu centralnego atomu zostały naszkicowane liniami przerywanymi. Źródło: adaptacja rysunku z pracy [23].



Rys. 4.3. Parametry dynamiczne ewolucji korelacji w funkcji odległości od centralnego spinu (a) Współczynnik proporcjonalności A_α dla zależności $\propto t^2$, zob. równanie (4.6); (b) Współczynnik proporcjonalności B_α dla reżimu $\propto t$, zob. równanie (3.5); (c) Poziom wysycenia korelacji C_α^∞ , zob równanie (3.7); (d) Czas przejścia $t_0^{(\alpha)}$ pomiędzy reżimem kwadratowym a liniowym; (e) Czas przejścia $t_1^{(\alpha)}$ pomiędzy reżimem liniowym i wysyceniem. na każdym z rysunków naszkicowano analityczne zależności otrzymane przy użyciu modelu centralnego atomu. Dopasowują się one do danych numerycznych. Wyjątek stanowi zmiana trendu w C_α^∞ and $t_1^{(\alpha)}$. Źródło: [23].



Rys. 4.4. (a-c) Mapa czasowej ewolucji funkcji korelacji $|C_\alpha(t)|$ (zob. równanie (4.2)) dla każdego spinu w układzie o $N = 1001$ węzłach, zasięgowi oddziaływania zadanego przez wykładnik $\mu = 1$ oraz dla trzech różnych wartości siły nieporządku $W = 2, 0.2, 0$. Kreskowaną linią zaznaczono front propagacji określony przez $C_\alpha(t) = \tilde{C}$, gdzie wartość $\tilde{C}$ podana jest w prawym górnym rogu każdego z paneli. Te same fronty falowe zostały narysowane w panelach (d-f) w skali podwójnie logarytmicznej, gdzie linia przerywana odpowiada analitycznym результатам otrzymanym w podrozdziale 4.5 (zob. równanie (4.18)). Osie zostały zamienione względem (a-c), aby lepiej reprezentowały propagację. Dodatkowo w (c) zaznaczono stożek świetlny zdefiniowany przez czas rozpoczęcia fazy saturacji w układzie wolnym od nieporządku (zob. równanie (4.25)). (g-i) $|C_\alpha(t)|$ w funkcji czasu dla atomów $\alpha = 0, 1, 4, 16, 64, 256, 500$. Przerywanymi liniami zaznaczono numeryczne rozwiązania dla modelu centralnego atomu. Liniami kropkowanymi w panelach (h) oraz (i) oznaczono graniczne wartości $C_0(\infty)$ oraz $|C_\alpha(\infty)|$ (takie same dla każdego α) w układzie wolnym od nieporządku (por. równanie (4.24)). Źródło: adaptacja rysunku z pracy [23].



Rys. 4.5. (a-c) Mapa czasowej ewolucji entropii splątania $S_\alpha(t)$ (zob. równanie (4.28)) dla każdego ze spinów w układzie $N = 1001$ spinów o szerokości rozkładu energii $W = 200$. Kolor odpowiada wartościom $S_\alpha(t)$ jako funkcji numeru węzła oraz czasu dla trzech różnych zasięgów oddziaływania (zadanych przez wykładnik $\mu = 1.0, 2.0, 3.0$). Dodatkowo przerywanymi liniami zaznaczono fronty propagacji, tj. zależność $t_{\tilde{S}}(|\alpha|)$, dla pewnej wartości entropii $S_\alpha(t) = \tilde{S}$, której wartość znajduje się w prawym górnym rogu każdego z wykresów. Odpowiadają one wartościom $\tilde{S}$ dla wykresów (d-f), gdzie fronty falowe zostały przedstawione w skali podwójnie logarytmicznej dla trzech różnych wartości $\tilde{S}$. (g-i) Entropia $S_\alpha(t)$ jako funkcja czasu dla wybranych atomów $\alpha = 0, 1, 4, 16, 64, 256, 500$. Widoczna jest potrójna dynamika ewolucji $t^2 \rightarrow t \rightarrow \text{const.}$ (por. podrozdział 4.3). Źródło: adaptacja rysunku z pracy [23].

Dyfuzja ekscytynu w dwuwymiarowym zespole kropek kwantowych

Ostatni rozdział mojej rozprawy poświęcam zbadaniu dynamiki ekscytynu w realistycznym układzie kropek kwantowych, z jakim spotyka się w swojej pracy fizyk eksperymentalny. Dotychczasowe rozważania miały bowiem charakter modelowy. W istocie dotyczyły zbadania właściwości konkretnego kwantowego modelu sieciowego oraz dynamiki pojedynczej cząstki poruszającej się w układzie opisywanym przez ten model. Dwuwymiarowy zespół kropek kwantowych stanowi dobry przykład realistycznego układu, do którego stosują się modelowe rozważania poprzednich rozdziałów.

5.1. Wprowadzenie

Dwuwymiarowe zespoły kropek kwantowych stanowią przykład zbioru dwupoziomowych emiterów kwantowych, w których zachodzi zjawisko koherentnej emisji fali elektromagnetycznej, nazywane zjawiskiem superradiancji. Pierwsza obserwacja transferu energii w kwantowym gazie atomów została dokonana w eksperymencie Cario i Francka [56] w 1922 r. Ponad 30 lat później w roku 1954 amerykański fizyk Robert H. Dicke [57] opisał teoretycznie koherentną emisję promieniowania z kwantowego gazu, która możliwa jest zarówno w przypadku gdy długości fali emisji przekracza rozmiary układu (co pozwala na korzystanie z tzw. przybliżenia dipolowego), jak i gdy rozmiar układu przekracza długość fali promieniowania. Koherencja emitowanej fali elektromagnetycznej świadczy o istnieniu sprzężenia pomiędzy poszczególnymi emiterami. Emisja z zespołu nie jest zwykłą sumą emisji poszczególnych atomów bądź cząsteczek gazu. Wzbudzony pojedynczy emiter wypromieniowuje falę o odpowiedniej długości, opróżniając się przy tym wykładniczo (tj. obsadzenie emitera maleje wykładniczo). W przypadku dwóch emiterów sytuacja staje się ilościowo i jakościowo różna. Jeśli pierwsza cząstka zostaje wzbudzona (obsadzona), a druga pozostaje w stanie podstawowym, po odpowiednio długim czasie obsadzenie obu cząstek rozłoży się po równo. Towarzyszyć temu będzie również emisja fotonu. Taka sytuacja świadczy o występowaniu sprzężenia pomiędzy emiterami, które bierze się z oddziaływania ze wspólnym rezerwuarem elektromagnetycznym. Oddziaływanie to nazywa się siłą dyspersyjną bądź *sprzężeniem Förstera* od nazwiska niemieckiego fizyka Theodora Förstera, który w 1959 r. wygłosił przed członkami Towarzystwa Faradaya¹ swój słynny wykład [58] wprowadzający na temat transferu wzbudzeń elektronowych w układach kwantowych. Dalsze rozważania efektu kolektywnej emisji były prowadzone przez R. H. Lehmberga, który formułuje ogólną teorię emisji od N atomów [2] w przypadku gdy rozmiary układu jako całości mogą

¹Ang. *Faraday Society* — Brytyjskie Towarzystwo zrzeszające naukowców zajmujących się chemią fizyczną założone w 1903 r. i nazwane na cześć Michaela Faradaya, jednego z ojców elektromagnetyzmu. Towarzystwo działało samodzielnie do 1980 r., po czym zostało złączone z innymi organizacjami naukowymi działającymi w Zjednoczonym Królestwie.

znacznie przekraczać długość emitowanej fali, wyprowadzając przy tym postać sprzężenia pomiędzy atomami, które ma charakter sumy trzech oscylujących członów, malejących z pewną potęgą odległości (zob. równania (5.6) oraz (5.7)).

W tym rozdziale rozważam dwuwymiarowy układ samorosnących kropek kwantowych. Zjawisko superradiancji zostało zaobserwowane eksperymentalnie w takim układzie [59] oraz było analizowane teoretycznie [19, 20]. Pobudziwszy mały obszar mesy, na której znajdują się kropki, zbiera się sygnał fotoluminescencji z poszerzonego obszaru względem powierzchni obszaru, na który pada fala pobudzająca [60]. Sugeruje to występowanie transferu wzbudzenia pomiędzy kropkami. Jak jednak pokazano w [60] efekt ten jest silniejszy dla zespołów kropek o mniejszej gęstości powierzchniowej. Za transfer nie może więc odpowiadać przekrycie funkcji falowych pomiędzy kropkami. Dobrym kandydatem na oddziaływanie między kropkami pozostaje siła dyspersyjna zaproponowana w [1–3], która odpowiedzialna jest za kolektywną emisję z zespołu kwantowych emiterów. W ramach niniejszego rozdziału badam, jak wzbudzenie rozchodzi się wewnątrz układu kropek, przyjmując skończony czas życia ekscytynu, co prowadzi do luminescencji. Wyniki tutaj przedstawione będą przypominać rezultaty rozdziału 3, gdzie rozważałem dyfuzję wzbudzenia na regularnej sieci w terminach średniego przemieszczenia kwadratowego. Różnić się będą jednak w kilku istotnych kwestiach. Po pierwsze, postać sprzężenia $V_{\alpha\beta}$ pomiędzy kropkami przyjmuje teraz bardziej złożoną trójczłonową postać o oscylującym charakterze. Zmianie ulega również rozmieszczenie emiterów. Naturalnie samorosnące kropki kwantowe rozmieszczone są losowo na mesie, nie zaś na regularnej sieci. Dodatkowo ekscyton w kropce ma skończony czas życia, co należy uwzględnić w obliczeniach. Pokazuję, że oryginalnie trójczłonowe i oscylujące sprzężenie daje się sprowadzić do prostej formy $\propto 1/r$ w reżimie dużych rozmiarów układu, tzn. wszystkie efekty zostają jakościowo odtworzone przy przyjęciu takiej uproszczonej postaci sprzężenia. Wykorzystuję przy tym rezultaty poprzednich rozdziałów rozprawy, znajdując podobnie jak poprzednio przybliżone rozwiązanie analityczne. Wykazuję również, że losowe rozmieszczenie kropek nie wpływa znacząco na odstępstwo od zaprezentowanej w rozdziale 3 dynamiki kwazicząstki. Posługując się przybliżonym rozwiązaniem analitycznym, znajduję parametry dynamiczne dyfuzji w układzie ze złożoną formą sprzężenia pomiędzy kropkami oraz losowym rozmieszczeniem kropek na kołowej mesie. Uwzględnienie dyssypacji w układzie wiąże się ze zmianą metody obliczeń. W symulacjach wyidealizowanego układu o nieskończonym czasie życia ekscytynu korzystam w dalszym ciągu z dokładnej diagonalizacji hamiltonianu (zob. Dodatek A). Porzucam jednak tę metodę na rzecz metody symulacji stochastycznych, kiedy konieczne staje się uwzględnienie rekombinacji ekscytynu.

Organizacja niniejszego rozdziału jest następująca. W podrozdziale 5.2 wprowadzam badany przeze mnie układ i model, którym jest opisywany wraz z równaniem ruchu. Następnie w podrozdziale 5.3 przedstawiam metodę symulacji stochastycznych (in. metoda skoków kwantowych lub metoda Monte Carlo dla funkcji falowej) pozwalającą na uwzględnienie dyssypacji w układzie. Następnie w podrozdziale 5.4 prezentuję wyniki symulacji zaprezentowanego wcześniej modelu, posługując się średnim przemieszczeniem kwadratowym oraz mapą obsadzeń w funkcji odległości od centrum wzbudzenia. Porównuję układ podlegający dyssypacji z wyidealizowanym układem o nieskończonym czasie życia ekscytynu. W podrozdziale 5.5 przystosowuję ogólne

Opis	Symbol	Wartość	Jednostka
Szybkość emisji spontanicznej	Γ_0	1.0/0.39	ns^{-1}
Rezonansowa długość fali (w próżni)	λ	479	nm
Współczynnik załamania	n_{refr}	2.6	-
Gęstość powierzchniowa kropek	ρ_2	0.001	nm^{-2}
Minimalna średnica kropki	d_{min}	10	nm
Zasięg oddziaływania krótkozasięgowego	r_0	15	nm

Tablica 5.1. Parametry materiałowe kropek kwantowych.

analityczne wyprowadzenia otrzymane w 3.3 oraz do pełnego modelu opisującego realistyczny układ. Na koniec, w podrozdziale 5.6 dyskutuję otrzymane wyniki.

5.2. Opis układu oraz wykorzystywanego modelu

Badany przeze mnie układ składa się z N samorosnących kropek kwantowych złożonych z CdSe/ZnSe (selenek cynku domieszkowany selenkiem kadmu), rozmieszczonych losowo na kołowym obszarze o promieniu R w płaszczyźnie prostopadłej do kierunku wzrostu, co odpowiada strukturze mezy wykorzystywanej w eksperymentalnym badaniu kropek kwantowych (por. Rys. 3.1(b)). Powierzchniowa gęstość kropek ρ_2 jest stała. Rozmiar układu rośnie wraz z liczbą kropek, tj. $N = \rho_2 \pi R^2$. Gęstość ρ_2 oraz inne parametry materiałowe są wypisane w Tabeli 5.1. Modeluję kropkę kwantową jako układ dwupoziomowy, tj. poza stanem podstawowym rozważam tylko jeden z dwóch najniższych jasnych stanów wzbudzonych w powłoce s przez pobudzenie światłem spolaryzowanym kołowo (prawoskrętnie bądź lewoskrętnie). Średnia energia wzbudzenia kropek opartych o selenek cynku (ZnSe) i selenek kadmu (CdSe) wynosi około 2 eV, a jej niejednorodność może osiągać kilkadziesiąt meV. Natomiast odległość do kolejnego stanu energetycznego w powłoce p jest rzędu 100 meV.

Fundamentalną energią wzbudzenia dla kropki o indeksie α oznaczam jako $E_\alpha = \bar{E} + \epsilon_\alpha$, gdzie $\bar{E}$ jest średnią energią przejścia dla zespołu kropek, natomiast ϵ_α jest odchyleniem od średniej, o którym przyjmuję, że pochodzi z rozkładu normalnego o zerowej średniej i wariancji σ^2 , tj. $E_\alpha \sim \mathcal{N}(\bar{E}, \sigma)$.

W przypadku gdy liniowy rozmiar układu $2R$ jest znacznie mniejszy niż długość fali promieniowania elektromagnetycznego, z którym oddziałuje układ, można stosować przybliżenie długofalowe, w którym potencjał wektorowy $\mathbf{A}(\mathbf{r}_\alpha, t)$ oraz skalarny $U(\mathbf{r}_\alpha, t)$ mogą być przybliżone pierwszym rzędem rozwinięcia w szereg Taylora co prowadzi do członów zawierających momenty dipolowe $\mathbf{d}_\alpha = q_\alpha \mathbf{r}_\alpha$. Zaniedbuje się przy tym człony wyższych rzędów nazywane *multipolowymi*. W takim przypadku można traktować układ złożony z wielu ładunków jako pojedynczy dipol i stąd to przybliżenie nazywa się *przybliżeniem dipolowym*. Gdy jednak rozmiar układu jako całości staje się porównywalny bądź przekracza długość fali, przybliżenie dipolowe przestaje być słuszne. Uogólnienie możliwe jest dzięki transformacji Powera-Zienau'a-Woolley'a

(PZW) [61], która przekształca hamiltonian sprzężenia minimalnego do postaci poprawnej, gdy rozmiar układu przekracza długość fali promieniowania². Po transformacji PZW otrzymuje się

$$(5.1) \quad H = H_{\text{at}} + \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_k b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} - \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \sum_{\alpha=0}^{N-1} \mathbf{d}_\alpha \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}_\alpha),$$

gdzie pierwszy człon to hamiltonian (sztucznych) atomów,

$$(5.2) \quad H_{\text{at}} = \sum_{\alpha=0}^{N-1} \epsilon_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha,$$

$a_\alpha^\dagger$ (a_α) jest operatorem kreacji (anihilacji) ekscytynu w kropce o indeksie α , $b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ ($b_{\mathbf{k}\lambda}$) jest operatorem kreacji (anihilacji) fotonu o energii $\hbar\omega_k$. Ostatni człon w (5.1) odpowiada za sprzężenie pomiędzy falą elektromagnetyczną a kropkami kwantowymi, z których każda jest traktowana jako punktowy dipol; $\mathbf{d}_\alpha = \mathbf{d}_0 a_\alpha$ jest operatorem dipolowym dla kropki o indeksie α , natomiast pole przemieszczeń $\mathbf{D}(\mathbf{r}_\alpha)$ zostaje wyrażone w terminach fotonowych operatorów kreacji i anihilacji,

$$(5.3) \quad \mathbf{D}(\mathbf{r}_\alpha) = i \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{\hbar \varepsilon_0 \varepsilon_r \omega_k}{2V}} \hat{\mathbf{e}}_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \text{h.c.}$$

Ten ostatni człon hamiltonianu pochodzi bezpośrednio z transformacji PZW.

Stan układu opisywany jest macierzą gęstości $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. Ponieważ badany układ fizyczny jest układem otwartym, niemożliwe jest posługiwanie się równaniem na funkcję falową. Aby znaleźć ewolucję stanu układu, należy znaleźć równanie ruchu dla macierzy gęstości. Aby tego dokonać, wyprowadza się najpierw równanie ruchu według schematu podanego w [2] dla dowolnego operatora Q , będącego kombinacją operatorów atomowych. Ewolucją operatora $Q(t)$ rządzi hamiltonian H , który wyrażony jest zarówno przez operatory atomowe jak i fotonowe. Najpierw znajduje się ewolucję operatorów fotonowych $b_{\mathbf{k}\lambda}(t)$, $b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t)$ i wyraża je przez operatory atomowe. Dzięki temu pozbywa się operatorów fotonowych z równania na $Q(t)$. Następnie pomija się człony pozarezonansowe oraz przesunięcia energii powodowane promieniowaniem a na koniec dokonuje się przybliżenia Markowa. W ten sposób dostaje się równanie na ewolucję obserwabli $\langle Q(t) \rangle$, gdzie $\langle \dots \rangle$ jest średnią kwantowomechaniczną. Ostatecznie wyprowadzone równanie zapisuje się w obrazie Schrödingera dla zredukowanej macierzy gęstości układu kropek. Przyjmuje ono postać

$$(5.4) \quad \dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H_0, \rho] + \sum_{\alpha, \beta} \Gamma_{\alpha\beta} \left[a_\alpha \rho a_\beta^\dagger - \frac{1}{2} \{ a_\beta^\dagger a_\alpha, \rho \} \right],$$

gdzie

$$(5.5) \quad H_0 = H_{\text{at}} + \sum_{\alpha, \beta} V_{\alpha\beta}^{(\text{LR})} a_\alpha^\dagger a_\beta$$

²Transformacja PZW oryginalnie transformuje człon klasycznego lagrangianu odpowiedzialny za oddziaływanie ładunków z polem przed dodanie pochodnej czasowej pewnej funkcji zaproponowanej przez Powera, Zienau oraz Woolleya.

jest hamiltonianem, który rządzi unitarną ewolucją stanu $|\Psi\rangle$. Drugi człon w (5.5) odpowiada sprzężeniom pomiędzy kropkami, którym pośredniczy wspólny rezerwuuar elektromagnetyczny promieniowania (siła dyspersyjna [1–3] wspomniana we Wprowadzeniu do tego rozdziału),

$$(5.6) \quad V_{\alpha\beta}^{(\text{LR})} = -\hbar\Gamma_0 G(k_0 r_{\alpha\beta}).$$

$\Gamma_0 \equiv 1/\tau = |d_0|^2 k_0^2 / (3\pi\epsilon_0\epsilon_r)$ jest prawdopodobieństwem spontanicznej emisji (tj. rekombinacji) na jednostkę czasu, gdzie τ jest czasem wykładniczego zaniku wzbudzenia; $k_0 = 2\pi n_{\text{refr}}/\lambda = n_{\text{refr}}\bar{E}/(\hbar c)$, gdzie c jest prędkością światła w próżni, natomiast $n_{\text{refr}} = \sqrt{\epsilon_r}$ jest współczynnikiem załamania światła sztucznego atomu. Sprzężenie ma charakter funkcji dalekiego zasięgu i zmienia się z odległością jak

$$(5.7) \quad G(x) = -\frac{3|\hat{d}_\perp|}{4} \frac{\cos x}{x} - \frac{9|\hat{d}_\parallel|}{4} - 3 \left(\frac{\sin x}{x^2} + \frac{\cos x}{x^3} \right)$$

gdzie $\hat{d}_\perp$ oraz $\hat{d}_\parallel$ są składowymi wersora $\hat{d}_0 = \mathbf{d}_0/d_0$ odpowiednio prostopadłymi i równoległymi do $\mathbf{r}_\alpha$. Drugi człon w równaniu (5.4) odpowiada za dyssypację wynikającą ze skończonego czasu życia ekscytynu, a więc również skończonego czasu emisji promieniowania. Element macierzowy $\Gamma_{\alpha\beta} = \hbar\Gamma_0 F(k_0 r_{\alpha\beta})$, gdzie

$$(5.8) \quad F(x) = \frac{3|\hat{d}_\perp|}{2} \frac{\sin x}{x} - \frac{9|\hat{d}_\parallel|}{2} - 3 \left(\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x^3} \right).$$

Przy założeniu, że wzbudzane są jedynie ekscytyny ciężkodziurowe,

$$(5.9) \quad \hat{d}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix},$$

zatem $|\hat{d}_\perp|^2 = |\hat{d}_\parallel|^2 = 1/2^3$ i funkcje $G(x)$ i $F(x)$ przyjmują postać

$$(5.7') \quad G(x) = -\frac{3}{8} \left(\frac{\cos x}{x} + \frac{\sin x}{x^2} + \frac{\cos x}{x^3} \right)$$

oraz

$$(5.8') \quad F(x) = \frac{3}{4} \left(\frac{\sin x}{x} - \frac{\cos x}{x^2} + \frac{\sin x}{x^3} \right).$$

Posługując się przedstawionym modelem, autorzy w [20] pokazują, że natężenie luminescencji jest proporcjonalne do

$$(5.10) \quad I(t) = \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha\beta} \text{Tr}(\rho(t) a_\alpha^\dagger a_\beta).$$

Jako że ewolucja układu nie jest unitarna, niemożliwe jest znalezienie stanu układu przez dokładną diagonalizację hamiltonianu. Równanie ruchu (5.4) można scałkować numerycznie,

³Widać to łatwo, gdyż

$$\hat{d}_\parallel = (\hat{d}_0 \cdot \hat{r}_{\alpha\beta}) \hat{r}_{\alpha\beta}$$

podstawiając za $\hat{r}_{\alpha\beta} = (x, y, 0)/\sqrt{x^2 + y^2}$ oraz $\hat{d}_0$ zgodnie z równaniem (5.9) a następnie licząc długość do kwadratu otrzymuje się $|\hat{d}_\parallel|^2 = 1/2$.

jednak złożoność obliczeniowa takiego rozwiązanie jest duża i ogranicza możliwość badania większych układów. W następnym podrozdziale zostanie przedstawiona równoważna metoda rozwiązania równania ruchu, która w znacznym stopniu redukuje zużycie pamięci komputera i pozwala na symulowanie dużych układów.

5.3. Metoda skoków kwantowych

W tym podrozdziale opisuję stosowaną przeze mnie metodę symulacji stochastycznych nazywaną również metodą Monte Carlo dla funkcji falowej (ang. *Monte Carlo wave function method*) w celu rozwiązania równania ruchu (5.4). Podążam tutaj za sposobem prezentacji tej metody zaproponowanym w [20]. Przez skok kwantowy należy tutaj rozumieć rekombinację promienistą wynikającą ze skończonego czasu życia ekscytynu. Należy napisać równanie ruchu (5.4) w równoważnej postaci

$$(5.11) \quad \dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} \left(H_{\text{eff}} \rho - \rho H_{\text{eff}}^\dagger \right) + \sum_i \tilde{\Gamma}_i \tilde{a}_i \rho \tilde{a}_i^\dagger,$$

gdzie

$$(5.12) \quad H_{\text{eff}} = H_0 + \frac{\hbar}{2i} \sum_{\alpha\beta} \Gamma_{\alpha\beta} a_\beta^\dagger a_\alpha,$$

jest niehermitowskim hamiltonianem, który rządzi ewolucją układu do momentu skoku, $\tilde{\Gamma}_i$ są wartościami własnymi macierzy $\Gamma_{\alpha\beta}$ o wektorach własnych $u_{i\alpha}$ (pierwszy indeks numeruje stan, natomiast drugi indeks — kolejne składowe wektora), tj.

$$(5.13) \quad \sum_{\alpha\beta} u_{i\alpha} \Gamma_{\alpha\beta} u_{j\beta}^* = \tilde{\Gamma}_i \delta_{ij}.$$

Istotą metody skoków kwantowych jest zastąpienie równanie ruchu na macierz gęstości przez proces stochastyczny, w którym rozważa się ewolucję wektora stanu $|\Psi\rangle$ w sposób ciągły wzdłuż pewnej trajektorii w przestrzeni Hilberta według równania

$$(5.14) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H_{\text{eff}} |\Psi\rangle$$

gdzie raz na jakiś czas występuje skok (nieciągłość w procesie), co pociąga za sobą transformację stanu układu według wzoru

$$(5.15) \quad |\Psi\rangle \rightarrow \frac{\sqrt{\tilde{\Gamma}_i \tilde{a}_i} |\Psi\rangle}{\left| \sqrt{\tilde{\Gamma}_i \tilde{a}_i} |\Psi\rangle \right|^{1/2}},$$

gdzie

$$(5.16) \quad \tilde{a}_i = \sum_{\alpha} u_{i\alpha} a_{\alpha}.$$

W zadanym układzie skok odpowiada promienistej rekombinacji pojedynczego ekscytynu. Dalsza ewolucja po skoku nie jest możliwa. W ogólności jednak metoda pozwala na symulację układów o kilku ekscytonach. Trzeba przy tym pamiętać, że rozmiar przestrzeni Hilberta rośnie wraz z liczbą ekscytonów X_{num} jak $N!/(N - X_{\text{num}})!$. Zwiększając liczbę wzbudzeń w układzie, utrudnione staje się rozważania dużych układów z powodu rosnącej złożoności obliczeniowej.

Czas oczekiwania na kolejny skok jest zmienną losową o dystrybucji⁴

$$(5.17) \quad F(t) = 1 - \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$$

Względne prawdopodobieństwo, że skok będzie miał miejsce, wynosi [20]

$$(5.18) \quad p_i = \frac{\tilde{\Gamma}_i \langle \Psi(t) | \tilde{a}_i^\dagger \tilde{a}_i | \Psi(t) \rangle}{\sum_i \tilde{\Gamma}_i \langle \Psi(t) | \tilde{a}_i^\dagger \tilde{a}_i | \Psi(t) \rangle}.$$

Numeryczna implementacja metody skoków kwantowych dla pojedynczego wzbudzenia (a więc i pojedynczego skoku) polega na numerycznym całkowaniu ewolucji układu zadanej przez (5.14), gdzie przy każdym kroku czasowym sprawdza się, czy norma $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$ nieunormowanej funkcji falowej $|\Psi(t)\rangle$ nie osiąga pewnej pseudolosowej liczby x pochodzącej z jednostajnego rozkładu prawdopodobieństwa $x \sim \mathcal{U}(0, 1)$. Wykonuję N_{rep} symulacji dla zadanej liczby kropek oraz zadanej wartości nieporządku, gdzie przy każdej realizacji zmieniają się losowe energie wzbudzenia na każdej z kropek, losowe położenia kropek oraz liczba x .

5.4. Wyniki symulacji numerycznych

W tym podrozdziale prezentuję wyniki symulacji numerycznych modelu przedstawionego w podrozdziale 5.2 za pomocą metody skoków kwantowych wprowadzonej w podrozdziale 5.3 dla układu z dyssypacją energii. Równolegle, przedstawiam wyniki symulacji dla wyidealizowanego układu o nieskończonym czasie życia ekscytynu. Rezultaty będą jakościowo podobne do przedstawionych uprzednio w rozdziale 3. Potrójna dynamika średniego przemieszczenia kwadratowego zostaje odtworzona pomimo bardziej złożonej postaci potencjału (5.6) o oscylującym charakterze i losowego rozmieszczenia kropek. Skończony czas życia ekscytynu prowadzi do ilościowej zmiany dynamiki dyfuzji oraz skutkuje w ustaniu ewolucji w pewnej chwili czasu.

A. Potrójna dynamika dyfuzji. Na Rys. 5.1 przedstawiam średnie przemieszczenie kwadratowe (3.2) w funkcji czasu dla różnych wartości rozmiaru układu i siły nieporządku. Dyfuzja przebiega w trzech następujących po sobie fazach (por. podrozdział 3.2B).

Ewolucja rozpoczyna się od ruchu balistycznego ze stałą prędkością v (por. równanie (3.4)),

$$(5.19) \quad \langle r^2(t) \rangle = v^2 t^2 \quad \text{dla} \quad t < t_0.$$

Następnie w pewnej chwili czasu t_0 następuje zmiana charakteru dynamiki na dyfuzję standardową ze stałą dyfuzji D (por. równanie (3.5)),

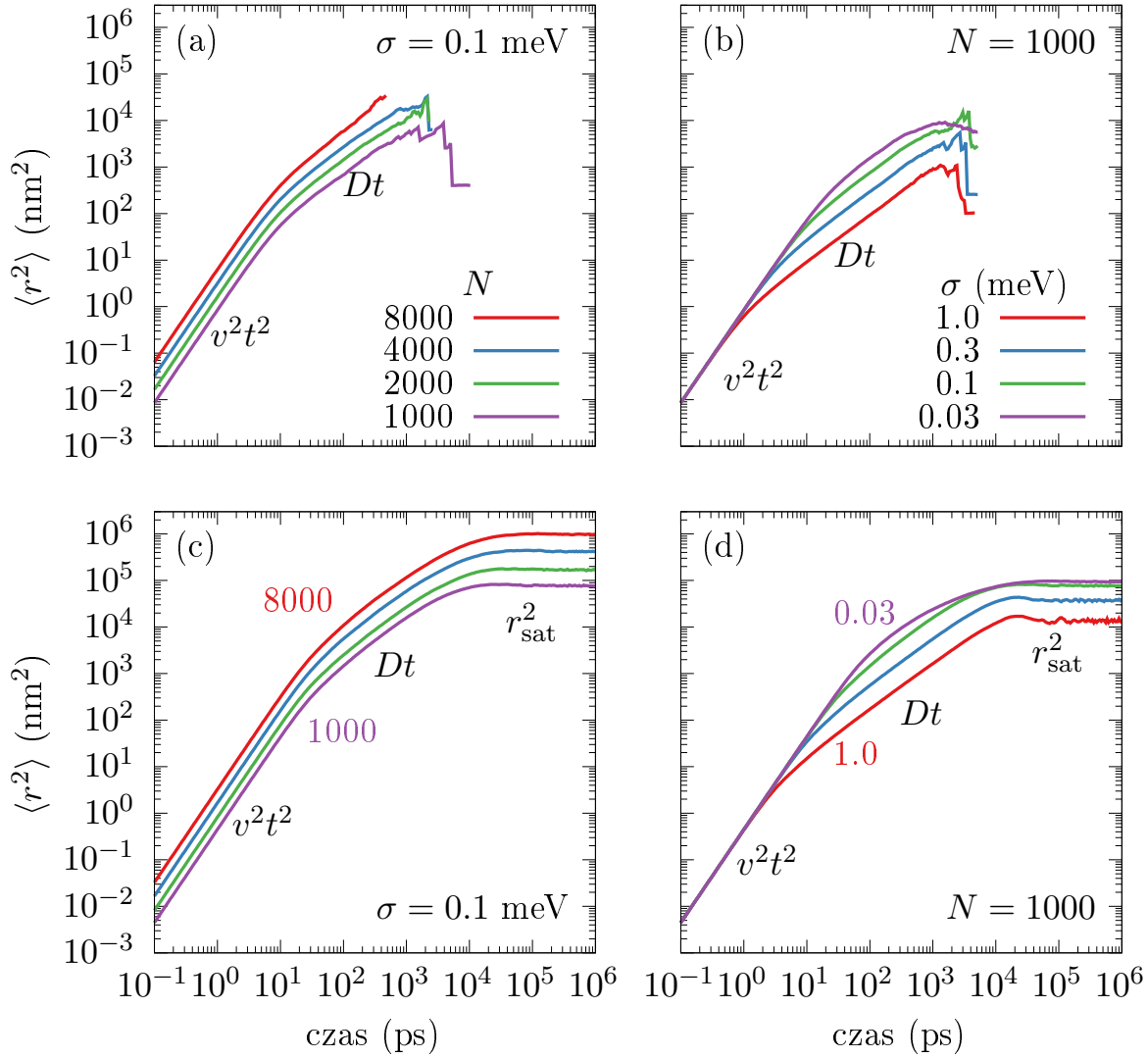
$$(5.20) \quad \langle r^2(t) \rangle = Dt \quad \text{dla} \quad t_0 < t < t_1.$$

Na koniec dynamika średniego przemieszczenia kwadratowego wysycha się (por. równanie (3.7)),

$$(5.21) \quad \langle r^2(t) \rangle = r_{\text{sat}}^2 \quad \text{dla} \quad t_1 < t,$$

co jest widoczne jedynie w przypadku przyjęcia nieskończonego czasu życia ekscytynu. Utrzymanie saturacji przy obecności dyssypacji jest niemożliwe, gdyż czas osiągnięcia saturacji t_1 jest rzędu kilku nanosekund (zob. Rys. 5.3c,d), tj. znacznie przekracza czas wykładniczego zaniku $\tau = 390$ ps przyjęty w modelu. Gdy dojdzie do całkowitej rekombinacji ekscytynu,

⁴Zob. równanie (7.12) w [62].

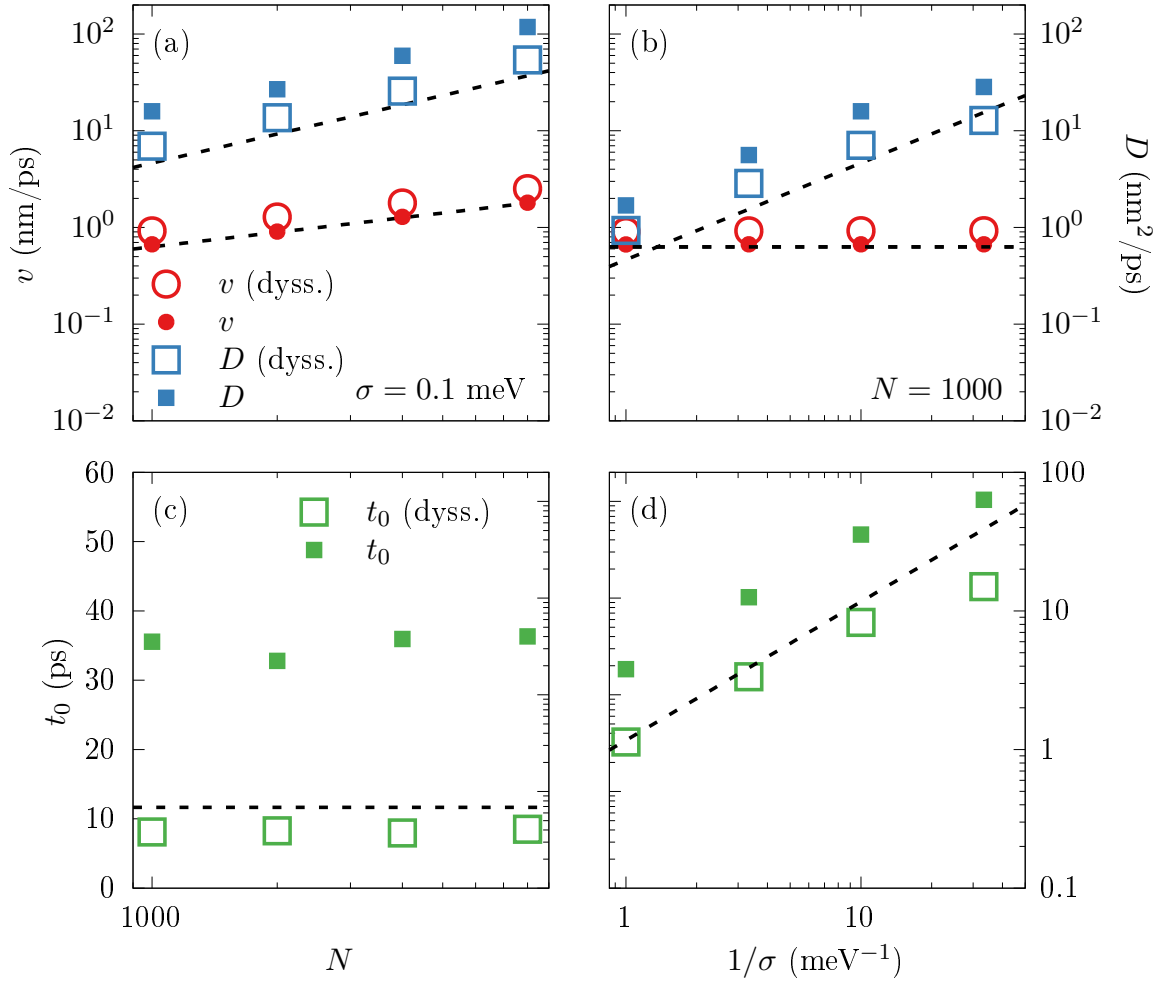


Rys. 5.1. Średnie przemieszczenie kwadratowe ekscytynu od miejsca początkowego wzbudzenia w funkcji czasu (a,b) dla układu, w którym występuje dyssypacja energii z czasem wykładniczego zaniku $\tau = 390$ ps oraz (c,d) w wyidealizowanym układzie z nieskończonym czasem życia ekscytynu. W pierwszej kolumnie (a,c) narysowano średnie przemieszczenie kwadratowe dla różnych rozmiarów układu i jednej wartości odchylenia standardowego energii $\sigma = 0.1$ meV, natomiast w drugiej kolumnie (b,d) dla różnych wartości siły nieporządku i układu o ustalonym rozmiarze $N = 1000$ kropek kwantowych.

średnie przemieszczenie kwadratowe spada do zera, $\langle r^2(t) \rangle = 0$. Podobnie jak poprzednio, czasy graniczne pomiędzy fazami ruchu wyrażają się odpowiednio przez

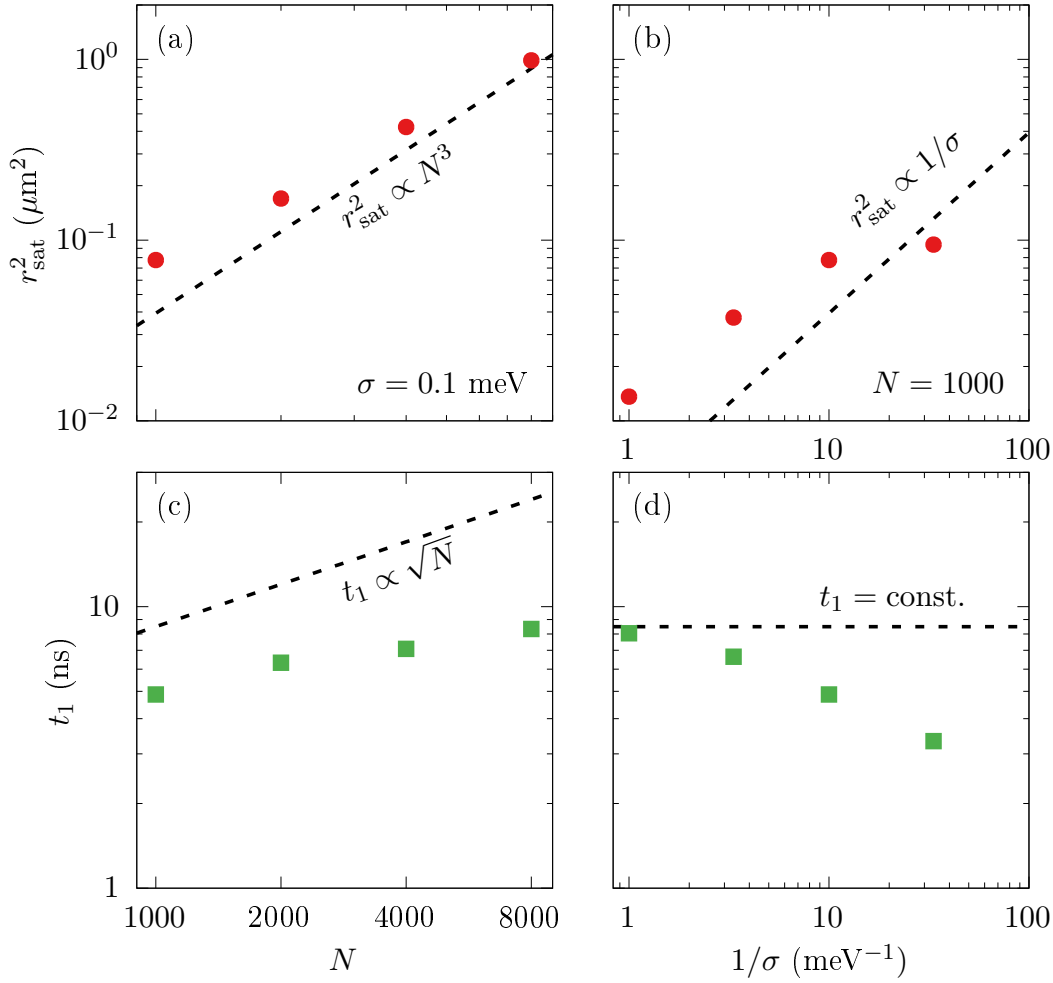
$$(5.22) \quad t_0 = D/v^2 \quad \text{oraz} \quad t_1 = r_{\text{sat}}^2/D.$$

B. Parametry dynamiczne. Aby znaleźć parametry dynamiczne, tj. prędkość balistyczną, współczynnik dyfuzji oraz poziom wysycenia, dopasowałem numerycznie funkcje (5.19–5.21)



Rys. 5.2. Zależność parametrów dynamicznych: (a,b) prędkości balistycznej oraz stałej dyfuzji; (c,d) czasu przejścia pomiędzy fazą balistyczną a dyfuzyjną dla układu z dyssypacją (puste, większe symbole) oraz wyidealizowanego układu z nieskończonym czasem życia ekscytynu (małe, wypełnione symbole) w funkcji rozmiaru układu (a,c) oraz siły nieporządku (b,d). Liniami przerywanymi oznaczono analityczne relacje wyprowadzone w podrozdziale 5.5.

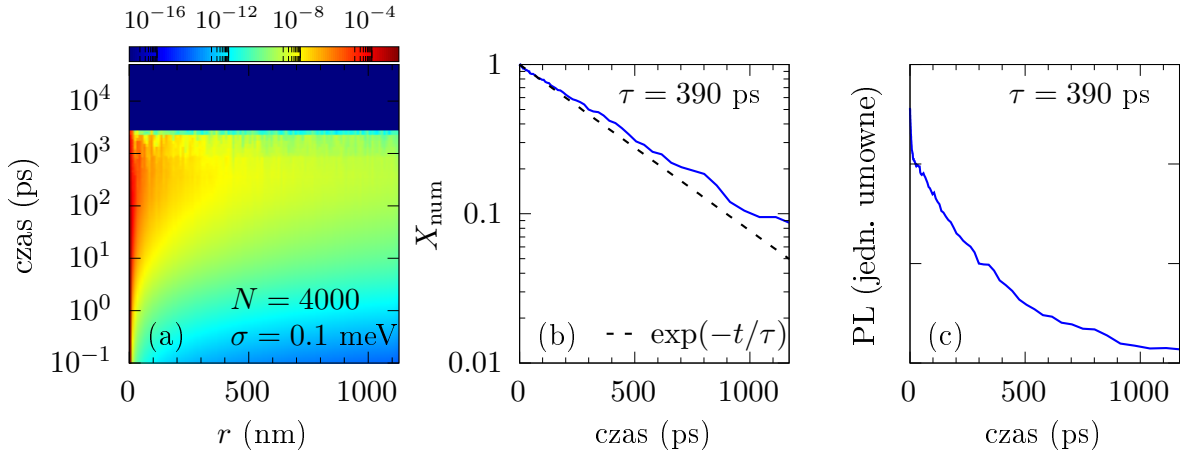
do odpowiednich faz ruchu dla różnych rozmiarów układu oraz wielkości nieporządku. Na Rys. 5.2 przedstawiam zależność prędkości balistycznej, współczynnika dyfuzji oraz czasu przejścia pomiędzy fazą balistyczną i dyfuzyjną w zależności od rozmiaru układu [panele (a,c)] oraz wielkości nieporządku [panele (b,d)] (por. Rys. (3.3)). Są one liniami prostymi w skali podwójnie logarytmicznej, odpowiadają zatem pewnemu prawu potęgowemu. Prędkość balistycznej fazy ruchu rośnie z rozmiarem układu, o czym świadczy Rys. 5.1(a,c) oraz Rys. 5.2(a) lecz jest niezależna od siły nieporządku, co widać na Rys. 5.1(b,d) oraz Rys. 5.2(b). Współczynnik dyfuzji rośnie z rozmiarem układu [Rys. 5.1(a,c) oraz Rys. 5.2(b)] oraz jest odwrotnie proporcjonalny do siły nieporządku [Rys. 5.2(b)], chociaż dla zmniejszającego się nieporządku dostrzegalne



Rys. 5.3. (a,b) Poziom wysycenia średniego przemieszczenia kwadratowego r_{sat}^2 oraz czas t_1 rozpoczęcia fazy wysycenia (c,d) w funkcji liczby kropek (a,c) oraz siły nieporządku (b,d). Przerywanymi liniami zaznaczono przybliżone rozwiązanie analityczne otrzymane w podrozdziale 5.5.

jest odchylenie początkowo liniowego trendu. Pierwszy czas graniczny t_0 znaleziony jest bezpośrednio jako iloraz D i v^2 . Dla zadanej siły nieporządku nie zmienia się z rozmiarem układu. Podobnie jak współczynnik dyfuzji rośnie on odwrotnie proporcjonalnie do siły nieporządku.

Wyznaczenie poziomu oraz czasu rozpoczęcia się wysycenia było możliwe jedynie dla wyidealizowanego układu, w którym nie zachodzi dyssypacja (zob. Rys. 5.3). Poziom saturacji rośnie z rozmiarem układu oraz maleje ze wzrastającą siłą nieporządku. Czas rozpoczęcia saturacji rośnie z rozmiarem układu oraz maleje z siłą nieporządku. Należy zauważyć, że w przeciwieństwie do układu rozważanego w rozdziale 3, gdzie t_1 był niezależny od nieporządku, teraz t_1 zmienia się monotonicznie wraz z nieporządkiem. Warto tutaj zwrócić uwagę, że potrójna dynamika dyfuzji nie ma tak ostro wyznaczonych granic czasowych jak w przypadku modelowego układu z rozdziału 3. Widać to wyraźnie na Rys. 5.2(c,d). Fazę saturacji poprzedza załamanie się dyfuzji standardowej w kierunku subdyfuzji. Czas t_1 wyznaczony jest natomiast jako ostra granica pomiędzy fazą dyfuzyjną a wysyceniem.



Rys. 5.4. (a) Mapa obsadzeń w funkcji odległości od początkowo wzbudzonej kropki oraz czasu ewolucji dla układu $N = 4000$ kropek kwantowych, siły nieporządku energii $\sigma = 0.1$ meV oraz czasu wykładniczego zaniku $\tau = 390$ ps. (b) Liczba ekscytonów w układzie. Pojedynczy ekscyton relaksuje z czasem wykładniczego zaniku $\tau = 390$ ps. Przerywaną linią zaznaczono idealny wykładniczy zanik dla zadanego τ . (c) Natężenie fotoluminescencji w funkcji czasu. Wyniki otrzymane dla $N_{\text{rep}} = 100$ realizacji nieporządku energii i położeń kropek.

C. Zasięg dyfuzji. Fotoluminescencja. Eksperymentalna obserwacja transportu w zespołach kropek kwantowych została przedstawiona w [60]. Transport może zachodzić nawet poza obszar pobudzania, gdyż obserwowana przestrzenna szerokość fotoluminescencji przekracza szerokość połówkową plamki lasera pobudzającego. W prowadzonych tu rozważaniach, gdzie rozważam tylko pojedynczy ekscyton, nie jest możliwa symulacja układu zadanego w eksperymencie, gdzie pobudza się obszar o powierzchni $\sim \mu\text{m}^2$, na którym to mogą znajdować się tysiące kropek. Symulacja układów z tak dużą liczbą wzbudzeń przekracza możliwości mocy obliczeniowej komputera. Zasięg dyfuzji pojedynczego ekscytonu wynosi około 100 nm [Rys. 5.1(a,b)], co odpowiada czasowi kilku nanosekund. Wzbudzenie rozprzyna się po całym układzie jak jest to pokazane na Rys. 5.4(a), obsadzenia odległych kropek są niewielkie, mniejsze niż 10^{-8} . Niemniej jednak w obszarze 100 nm wokół centrum wzbudzenia w kilka nanosekund po wzbudzeniu obsadzenia utrzymują się na poziomie $\sim 10^{-4}$. Intensywność fotoluminescencji przedstawiona na Rys. 5.4(c) w funkcji czasu jest wciąż niezaniechwalna dla tego reżimu czasowo-przestrzennego.

D. Wpływ dyssypacji. Wyznaczone wartości prędkości balistycznej oraz współczynnika dyfuzji różnią się od siebie w zależności od występowania bądź niewystępowania dyssypacji. Prędkość balistyczna w układzie z dyssypacją jest większa o pewną stałą wartość względem prędkości w układzie wyidealizowanym. Dyssypacja prowadzi zatem do przyspieszenia dyfuzji w jej pierwszej fazie. Oznacza to w istocie szybsze opróżnianie się centralnej kropki na korzyść pozostałych węzłów w układzie z dyssypacją. Odwrotnie, podczas drugiej fazy ruchu, współczynnik dyfuzji w idealnym układzie przekracza współczynnik dyfuzji w układzie poddanym dyssypacji. Oznacza to, że dyssypacja powoduje zwolnienie dyfuzji w drugiej fazie ruchu. Układ opróżnia

się wykładniczo z ekscytynu (zob. Rys. 5.4(b)), co pociąga za sobą spadek obsadzeń wszystkich kropek. Stąd średnie przemieszczenie kwadratowe (3.2) ma niższą wartość niż przy zachowanej sumie obsadzeń. Dodatkowo druga faza ruchu zaczyna się szybciej w układzie z dyssypacją. Ostatecznie, w układzie z dyssypacją i przy realistycznym czasie relaksacji $\tau = 390$ ps, niemożliwe jest osiągnięcie saturacji przed całkowitą rekombinacją ekscytynu. Ciekawym jest również, że jak wynika z Rys. 5.4(b) rekombinacja jest wolniejsza od modelowego wykładniczego zaniku $\exp(-t/\tau)$.

5.5. Przybliżone rozwiązanie analityczne

Dotychczas analityczne wzory otrzymane w podrozdziałach 2.10–2.12 znalazły zastosowanie w jakościowym oraz ilościowym określeniu średniego przemieszczenia kwadratowego (rozdział 3) oraz rozchodzenia się korelacji (rozdział 4). Teraz korzystając z analitycznych wzorów na obsadzenia, znajdzie prędkości dyfuzji balistycznej oraz współczynnik dyfuzji w realistycznym zespole kropek kwantowych.

Zasadnicza różnica pomiędzy wyprowadzeniami z rozdziału 3 sprowadza się do bardziej ogólnej postaci sprzężenia, które dane jest równaniem (5.6). Przedstawię teraz argumentację na rzecz uproszczenia formy sprzężenia pomiędzy kropkami. Średnia odległość pomiędzy kropkami przy gęstości powierzchniowej 0.001 nm^{-2} wynosi 32 nm. Jest ona mniejsza od długości fali promieniowania, z którym oddziałuje układ, a która w próżni wynosi $\lambda = 479 \text{ nm}$, co daje $\lambda/n_{\text{refr}} \approx 184 \text{ nm}$ w materiale. Jednakże liniowy rozmiar całego układu może znacząco przewyższać tę długość. Dla układów dostępnych symulacjom numerycznym $N \sim 10^3$ liniowy rozmiar układu rzędu kilku tysięcy nanometrów przekracza kilkukrotnie długość fali promieniowania rezerwuaru elektromagnetycznego, w którym znajdują się kropki. Istotna jest przy tym długość fali w materiale, nie zaś w próżni. Dodatkowo, w układzie doświadczającym dużego nieporządku (względem siły sprzężenia) istotne są jedynie przeskoki pierwszego rzędu, prosto do odległych kropek. Dlatego sprzężenie określone przez funkcję $G(x)$ (5.7') można obciąć wyłącznie do pierwszego członu, który w zadanym reżimie parametrów jest największy,

$$(5.23) \quad G(x) \approx -\frac{3}{8} \frac{\cos(x)}{x}.$$

Aby znaleźć przybliżone rozwiązanie analityczne dla badanego układu, korzystam z wprowadzonej uprzednio formuły na średnie przemieszczenie kwadratowe (3.10), którą na potrzeby tego rozdziału zapisuję jako

$$(5.24) \quad \langle r^2(t) \rangle = 2\pi\rho_2 \int_0^R r^3 \langle |c_r|^2 \rangle dr,$$

gdzie $2\pi\rho_2 r dr$ odpowiada liczbie kropek leżących na pierścieniu kołowym o promieniu r i szerokości dr , pod warunkiem, że liczba losowo rozmieszczonych kropek jest duża, natomiast $V_r = V_{0\alpha}^{(LR)}$ dla kropek α leżących w odległości $|\mathbf{r}_{0\alpha}| = r$ od centralnej kropki. Postępując podobnie jak w podrozdziale 3.3, wyprowadzam parametry dynamiczne, tj. prędkość ruchu balistycznego oraz współczynnik dyfuzji dla dyfuzji standardowej.

A. Prędkość balistyczna. W modelu centralnego atomu obsadzenie w pierwszej fazie ruchu wynosi $\langle |c_r|^2 \rangle = |V_r|^2 t^2 / \hbar^2$ (por. równanie (2.100)). Podstawiam formułę na obsadzenie do wzoru (5.24) przyjmując sprzężenie postaci (5.6) z $G(x)$ danym przez (5.23) i otrzymuję

$$(5.25) \quad \langle r^2(t) \rangle = \frac{9\hbar^2 \Gamma_0^2}{64k_0^2} 2\pi \rho_2 \int_0^R \cos^2(k_0 r) r dr.$$

Następnie, ponieważ $1/k_0 \ll R$ funkcja $\cos(k_0 r)$ zawiera przynajmniej jeden okres w przedziale $(0, R)$ i całkę po dr można przybliżyć przez

$$(5.26) \quad \int_0^R \cos^2(k_0 r) r dr \approx \frac{1}{2} \int_0^R r dr = \frac{1}{4} R^2,$$

gdzie czynnik $1/2$ odpowiada średniej wartości funkcji cosinus do kwadratu. Ostatecznie, porównując otrzymane wyrażenie z równaniem (5.19) dostaje się kwadrat prędkości balistycznej

$$(5.27) \quad v^2 = \frac{9\Gamma_0^2}{64k_0^2} 2\pi \rho_2 \frac{R^2}{4} = \frac{9\Gamma_0^2 N}{128k_0^2}.$$

Powyższą zależność naszkicowałem liniami przerywanymi na Rys. 5.2(a,b). Doskonale dopasowuje się ona do wyników symulacji numerycznych dla układu bez dyssypacji. Zaniża natomiast prędkość balistyczną dla układu z dyssypacją.

B. Współczynnik dyfuzji. Dla średnich czasów (por. podrozdziały 2.12 oraz 3.3B) obsadzenie rośnie z czasem jak $\langle |c_r|^2 \rangle = 2\pi f_\infty(0) |V_r|^2 t / \hbar$ (por. równanie (2.101)). Podstawiając obsadzenie do równania (5.24), całkując podobnie jak w (5.26) Porównując otrzymany wynik z (5.20) otrzymuje się współczynnik dyfuzji,

$$(5.28) \quad D = \frac{9\sqrt{\pi} \hbar \Gamma_0^2}{128k_0^2 \sigma} N = \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{\sigma} v^2.$$

Powyższą analityczną formułę naszkicowałem na Rys. 5.2(a,b) przerywaną linią. Jakościowo odtwarza ona wyniki symulacji numerycznych (proporcjonalność do rozmiaru układu i odwrotna proporcjonalność do nieporządku). Zaniża jednak zarówno wyniki zarówno dla układu podlegającego dyssypacji jak i wolnego od dyssypacji. Dla malejącego nieporządku wyniki symulacji zaczynają odbiegać od trendu $1/\sigma$.

Czas przejścia pomiędzy fazą balistyczną a dyfuzyjną dany jest przez relację ciągłości średniego przemieszczenia kwadratowego (zob. równanie (5.22) oraz por. równanie (3.6)),

$$(5.29) \quad t_0 = \frac{\hbar \sqrt{\pi}}{\sigma},$$

i pokrywa się z czasem t_0 podanym w równaniu (3.13) dla normalnego rozkładu energii. Podobnie jak prędkość balistyczna i współczynnik dyfuzji, analityczne wyrażenie na czas przejścia narysowałem na Rys. 5.2(c,d). Zaniża on wyniki symulacji dla układu bez dyssypacji, ale przewyższa czas w układzie z dyssypacją. Czas t_0 otrzymany z symulacji dla małego nieporządku zaczyna odbiegać od trendu $1/\sigma$.

Zasięg dyfuzji balistycznej wynosi

$$(5.30) \quad \langle r^2(t_0) \rangle = \frac{9\hbar^2 \pi \Gamma_0^2 N}{128 k_0^2 \sigma^2},$$

a dla przykładowych wartości $N = 1000$, $\sigma = 0.2 \text{ meV}$, $\Gamma_0 = 1/0.39 \text{ ns}^{-1}$, $\lambda = 479 \text{ nm}$ przyjmuje wartość 3.68 nm . Jest więc mniejszy niż średnica kropki kwantowej przyjęta w symulacjach (zob. Tabela 5.1). Z fizycznego punktu widzenia w tak zadanym układzie transport balistyczny nie zachodzi. Jest to głównie spowodowane dużym odchyleniem standardowym nieporządku w porównaniu do słabego sprzężenia pomiędzy kropkami. Zmniejszanie nieporządku powoduje wzrost zasięgu dyfuzji balistycznej, ale wzór (5.30) jest słuszny jedynie w reżimie silnego nieporządku ($\sigma \gg \hbar \Gamma_0$).

C. Poziom wysycenia. Do wysycenia zdolny jest dojść układ jedynie o niefizycznie długim czasie życia ekscytonu. W dalszym ciągu poziom wysycenia wyprowadzam podobnie jak w podrozdziale 2.12 oraz 3.3 uwzględniając oscylujący charakter sprzężenia. Obsadzenie w fazie wysycenia dane jest wzorem

$$(5.31) \quad \langle |c_r(t \rightarrow \infty)|^2 \rangle = \frac{3}{8} \hbar \Gamma_0 \frac{|\cos(k_0 r)|}{k_0 r} \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma},$$

Pozostaje scałkować (5.24) po odległości,

$$(5.32) \quad r_{\text{sat}}^2 = \frac{3}{8} \frac{\hbar \Gamma_0 \pi^{3/2} \rho_2}{\sigma k_0} \int_0^R |\cos(k_0 r)| r^2 dr \approx \frac{1}{4} \frac{\hbar \Gamma_0 \sqrt{\pi} \rho_2}{\sigma k_0} R^3 \propto N^{3/2}.$$

gdzie zastąpiłem funkcję $|\cos(k_0 r)|$ jej wartością średnią na przedziale $r \in (0, 2\pi/k_0)$ równą $2/\pi$. Korzystając z ciągłości średniego przemieszczenia kwadratowego (zanim dojdzie do całkowitej dyssypacji), obliczam czas rozpoczęcia trzeciej fazy ruchu,

$$(5.33) \quad t_1 = \frac{32}{9\pi} \frac{k_0 R}{\Gamma_0} = \frac{32}{9\pi} k_0 R \tau \gtrsim \tau.$$

5.6. Dyskusja

Dyfuzja ekscytonu w realistycznym zespole kropek kwantowych odtwarza jakościowo dyfuzję dowolnej (kwazi)cząstki w silnie niejednorodnym układzie kwantowym z dalekozasięgowymi sprzężeniami malejącymi jak funkcja potęgowa odległości $\propto 1/r^\mu$. Zasadnicze różnice pomiędzy realistycznym układem kropek kwantowych a modelem zaprezentowanym w rozdziale 3 leżą w losowym rozmieszczeniu kropek w przeciwieństwie do regularnie rozmieszczonych atomów oraz w bardziej złożonej postaci sprzężenia, składającej się z trzech oscylujących członów, każdym malejącym z inną potęgą odległości $\mu = 1, 2$ oraz 3 . Zastosowane przybliżenie (5.23) prowadzi do przybliżonego rozwiązania analitycznego, które odtwarza jakościowo dynamikę dyfuzji. Odbiega jednak od niej ilościowo. Ponieważ średnia odległość między kropkami jest znacznie mniejsza niż długość emitowanej fali, dalsze człony w (5.7') mają znaczenie przy transporcie na małe i średnie odległości. Jak to zostało pokazane w podrozdziale (3.4) wyższe potęgi odległości w mianowniku sprzężenia nie mają wpływu na trójfazową dynamikę dyfuzji, a jedynie na wartość parametrów dynamicznych. Dla $\mu > 3/2$ (w układzie dwuwymiarowym) wkład do prędkości balistycznej jest niewielki i stały w granicy dużych układów (por. równania (3.19), (3.20) oraz Tabelę 3.1). Odmiennie ma się sprawa z poziomem saturacji. Wkład członu z $\mu = 3$

jest duży, proporcjonalny do liniowego rozmiaru układu (por. równanie (3.26) oraz Tabelę 3.1). Oscylujący charakter sprzężenia przeskalowuje jedynie średnie przemieszczenie kwadratowe o stałą wartość. Jakościowe odtworzenie wyników przez przybliżone rozwiązanie analityczne świadczy natomiast o wiodącej roli pierwszego członu funkcji $G(x)$ (5.7'). Dodatkowo eksperymentalna obserwacja transportu w kropkach kwantowych w [60] znajduje uzasadnienie w rozważaniach teoretycznych prowadzonych w ramach tego rozdziału.

Podsumowanie

W mojej rozprawie doktorskiej zbadałem dynamikę (kwazi)cząstki w modelu sieciowym z diagonalnym nieporządkiem i dalekozasięgowymi sprzężeniami malejącymi z odległością jak $1/r^\mu$. Przedstawiłem najważniejsze własności modelu, z czego niektóre z nich są nowatorskim i oryginalnym wkładem rozprawy do stanu wiedzy na temat badanego modelu oraz lokalizacji Andersona [rozdział 2]. Określiłem dynamikę kwantowej cząstki w zadanym modelu, posługując się analizą średniego przemieszczenia kwadratowego [rozdział 3] oraz bezpośrednio badając dynamikę obsadzeń na poszczególnych węzłach, wykazując potęgową lokalizację cząstki na sieci, a także wprowadzając stożek świetlny odgraniczający obszar, poza którym obsadzenia maleją znacznie szybciej niż wewnątrz tego obszaru [rozdział 4]. Ostatecznie wykorzystałem wyprowadzony aparat teoretyczny i wyniki badań nad ogólnym modelem do znalezienia dynamiki ekscytonu w realistycznym układzie kropek kwantowych ze skończonym czasem życia ekscytonu. Uważam, że cel rozprawy określony na początku w rozdziale „Cel, treść i struktura pracy” został osiągnięty.

Dodatek

A. Znajdowanie ewolucji czasowej z diagonalizacji hamiltonianu

Wektor stanu $|\Psi\rangle$ wyraża się w pewnej bazie stanów $\{|\alpha\rangle\}$ (skończonej lub nieskończonej).

$$(A.1) \quad |\Psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle.$$

Ewolucja stanu początkowego $|\alpha_0 = 0\rangle$ jest dana przez

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-iHt} |\alpha_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iHt} |n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n t} |n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n t} \sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle \\ (A.2) \quad &= \sum_{\alpha} \left(\sum_n e^{-iE_n t} \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle \right) |\alpha\rangle, \end{aligned}$$

gdzie $|n\rangle$ jest stanem własnym z odpowiadającą mu wartością własną E_n hamiltonianu. w powyższych wyprowadzeniach zostały wykorzystane relacje zupełności stanów własnych oraz stanów zlokalizowanych na węźle,

$$\begin{aligned} \sum_n |n\rangle \langle n| &= \mathbb{1}, \\ \sum_{\beta} |\alpha\rangle \langle \alpha| &= \mathbb{1}. \end{aligned}$$

Porównując (A.2) z (A.1) otrzymujemy

$$(A.3) \quad c_{\alpha}(t) = \sum_n \exp(-iE_n t) \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle.$$

Interesującym jest znalezienie asymptotycznej wartości obsadzenia $|c_{\alpha}(\infty)|^2$. W tym celu liczę najpierw obsadzenie węzła

$$(A.4) \quad |c_{\alpha}(t)|^2 = \sum_{n,m} e^{-i(E_n - E_m)t} \langle \alpha|n\rangle \langle n|\alpha_0\rangle \langle m|\alpha\rangle \langle \alpha_0|m\rangle.$$

W granicy długich czasów, eksponenta w (A.4) jest deltą Kroneckera δ_{nm} i asymptotyczne obsadzenie przyjmuje postać

$$(A.5) \quad |c_{\alpha}(\infty)|^2 = \sum_n |\langle \alpha|n\rangle|^2 |\langle \alpha_0|n\rangle|^2.$$

B. Poziom saturacji dla różnych rozkładów energii

Celem jest policzenie całki z równania (2.103),

$$(2.103') \quad \langle |c_r(\infty)| \rangle = 4V_r^2 \int_{2V_r}^{\sqrt{W^2 + 4V_r^2}} \frac{f_r(x)}{x^2} dx.$$

lub z równania (2.104),

$$(2.104') \quad \langle |c_r(\infty)| \rangle = 4V_r^2 \int_0^W \frac{f_\infty(x) dx}{x^2 + 4V_r^2},$$

najpierw dla rozkładu jednostajnego energii $\epsilon \in \mathcal{U}(-W/2, W/2)$, później dla rozkładu normalnego $\epsilon \in \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma)$.

A. Rozkład jednorodny. Dla jednostajnego rozkładu energii, $f_\infty(x)$ jako rozkład różnicy dwóch zmiennych losowych jest funkcją trójkątną

$$(B.1) \quad f_\infty(x) = \begin{cases} \frac{W - |x|}{W^2} & : x \in [-W, W], \\ 0 & : \text{poza tym.} \end{cases}$$

Policzę najpierw poziom saturacji posługując się formułą (2.104')

$$(B.2) \quad \begin{aligned} \langle |c_r(\infty)| \rangle &= \frac{4V_r^2}{W} \int_0^W \frac{dx}{x^2 + 4V_r^2} - \frac{4V_r^2}{W^2} \int_0^W \frac{x dx}{x^2 + 4V_r^2} \\ &= \frac{2V_r}{W} \arctg \left(\frac{W}{2V_r} \right) - \frac{2V_r^2}{W^2} \ln \left[1 + \left(\frac{2V_r}{W} \right)^2 \right] \approx \frac{\pi V_r}{W} \end{aligned}$$

W reżimie dużego nieporządku można zastosować przybliżenie $W/V_r \rightarrow \infty$ oraz zaniedbać człony drugiego rzędu w V_r/W . Otrzymuje się wtedy wynik spójny z równaniem (2.105).

Podaję tu również drugą metodę obliczenia poziomu saturacji z wykorzystaniem równania (2.103'). w tej metodzie przybliżam rozkład $f_r(x) \approx f_\infty(x)$. Jest to słuszne przybliżenie w reżimie silnego nieporządku.

$$(B.3) \quad \begin{aligned} \langle |c_r(\infty)| \rangle &\approx 4V_r^2 \int_{2V_r}^W \frac{f_\infty(x)}{x^2} dx \\ &= \frac{4V_r^2}{W} \int_{2V_r}^W \frac{dx}{x^2} - \frac{4V_r^2}{W^2} \int_{2V_r}^W \frac{dx}{x} \\ &= \frac{2V_r}{W} - \frac{4V_r^2}{W^2} \left[1 + \ln \left(\frac{W}{2V_r} \right) \right] \approx \frac{2V_r}{W}. \end{aligned}$$

Wynik otrzymany w równaniu (B.3) różni się od (B.2) o czynnik $\pi/2$.

B. Rozkład normalny. Rozkład różnic diagonalnych energii jest rozkładem różnicy dwóch zmiennych losowych pochodzących z rozkładu $\mathcal{N}(0, \sigma)$. Jest więc rozkładem $\mathcal{N}(0, \sqrt{2}\sigma)$, a jego gęstość prawdopodobieństwa wynosi

$$(B.4) \quad f_{\infty}(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\sigma} e^{-(x/2\sigma)^2}$$

Równanie (2.104') przyjmuje postać

$$(B.5) \quad \langle |c_r(\infty)| \rangle = \frac{2V_r^2}{\sqrt{\pi}\sigma} \int_0^{\infty} \frac{e^{-(x/2\sigma)^2}}{x^2 + 4V_r^2} dx = \frac{V_r\sqrt{\pi}}{2\sigma} \operatorname{erfc}\left(\frac{V_r}{\sigma}\right) e^{V_r^2/\sigma^2}$$

gdzie $\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{\infty} e^{-t^2} dt$ jest uzupełniającą funkcją błędu. Poniżej przedstawiam dowód, że całka w (B.5) odpowiada uzupełniającej funkcji błędu.

Funkcję błędu definiuje się jako

$$(B.6) \quad \operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt,$$

natomiast uzupełniającą funkcję błędu definiuje się jako

$$(B.7) \quad \begin{aligned} \operatorname{erfc}(z) &= 1 - \operatorname{erf}(z) \\ &= 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt. \end{aligned}$$

Pokażę, korzystając z [63], że uzupełniającą funkcję błędu można reprezentować również przez całkę

$$(B.8) \quad \operatorname{erfc}(z) \equiv \phi(z) = \frac{2}{\pi} e^{-z^2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-z^2 t^2}}{t^2 + 1} dt$$

W tym celu, zróżniczkuję funkcję $\phi(z)$ po zmiennej z po to, by później ją z powrotem scałkować. Pochodna po zmiennej z wynosi

$$(B.9) \quad \frac{d}{dz} \phi(z) = \frac{-4z}{\pi} e^{-z^2} \int_0^{\infty} e^{-z^2 t^2} dt = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-z^2}$$

Wykorzystując fakt, że $\phi(0) = 1$ oraz całkując, otrzymuje

$$\int_0^z \phi(z') dz' = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-z'^2} dz',$$

co daje wzór (B.7),

$$\phi(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-z'^2} dz' = \operatorname{erfc}(z).$$

Wybrane oznaczenia

d	wymiarowość układu
ϵ_α	energia na węźle α
$V_{\alpha\beta}$	sprzężenie pomiędzy węzłami α i β , w modelach sieciowych nazywane całką przeskoku [ang. <i>hopping (integral)</i>]
V_α	sprzężenie pomiędzy węzłem centralnym a węzłem α dla układu jednowymiarowego
$V(r), V_r$	sprzężenie węzła centralnego z węzłem odległym o r
L	bezwymiarowy liniowy rozmiar układu (wyrażony w stałych sieciowych)
N	całkowita liczba atomów w układzie
R	promień układu dla układów o symetrii sferycznej (połowa długości łańcucha dla $d = 1$, promień kołowej mesy dla $d = 2$ itd.)
$\langle r^2(t) \rangle$	średnie przemieszczenie kwadratowe
$C_\alpha(t)$	dwupunktowa funkcja korelacji
$c_\alpha(t), c_r(t)$	amplituda prawdopodobieństwa znalezienia (kwazi)cząstki na węźle α / w odległości r od centralnego węzła
$\mathcal{U}(a, b)$	jednorodny rozkład prawdopodobieństwa na przedziale $[a, b]$
$\mathcal{N}(\mu, \sigma)$	rozkład normalny prawdopodobieństwa o wartości oczekiwanej μ oraz odchyleniu standardowym σ
σ	odchylenie standardowe normalnego rozkładu $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ energii na węźle ϵ_α , miara diagonalnego nieporządku
W	szerokość rozkładu jednorodnego $\mathcal{U}(-W/2, W/2)$ energii na węźle, miara diagonalnego nieporządku
ζ_d	parametr geometryczny (zob. równanie (2.74))
n_r	liczba atomów leżąca na d -wymiarowej sferze o promieniu r
$\sigma_{x(y,z)}^\alpha, \sigma_\pm^\alpha$	jednocząstkowe operatory spinowe działające na węźle α
σ_α	łączny rozkład prawdopodobieństwa energii oraz położenia atomów (tylko w rozdziale 2)

$\mathcal{W}(X)$	rozkład prawdopodobieństwa zmiennej losowej $X(s)$ zadanej wzorem (2.58)
$[X(s)]_{\text{M.P.}}$	wartość najbardziej prawdopodobna zmiennej losowej $X(s)$
$a \propto b$	a jest proporcjonalne do b .
$a \sim b$	a jest rzędu b
$a \gtrsim b$	a jest większe i rzędu b
$A \setminus B$	różnica zbiorów A i B
$\Re z$	część rzeczywista liczby zespolonej z
$\Im z$	część urojona liczby zespolonej z
δE	separacja poziomów energetycznych
$\Delta E^{(2)}$	druga poprawka do energii w rachunku zaburzeń
$\mathbf{k}, k$	wektor falowy, liczba falowa (pasmo energetyczne)
$\mathbf{k}_0, k_0$	wektor falowy, liczba falowa (emitowana fala promieniowania)
n_{refr}	współczynnik załamania światła
λ	długość fali promieniowania w próżni
c	prędkość światła w próżni

Spis rysunków

1.1 Schematyczna ilustracja pojedynczego centrum rozpraszania.	16
1.2 Schematyczny rysunek funkcji skalującej $\beta(g)$.	19
1.3 Gęstość stanów dla pojedynczej realizacji nieporządku dla różnych wartości siły nieporządku oraz przekrój stanów własnych o różnych energiach i dla różnych wartości nieporządku.	23
1.4 Średni stosunek uczestnictwa w funkcji energii.	24
1.5 Schematyczny rysunek gęstości stanów w trójwymiarowym modelu Andersona.	25
2.1 Pasma energetyczne dla jednowymiarowego łańcucha ze sprzężeniami $\propto 1/r^\mu$. Gęstość stanów w funkcji liczby falowej oraz w funkcji energii.	33
2.2 Schematyczny rysunek obrazujący potrójną dynamikę obsadzeń — normalny rozkład energii.	45
2.3 Schematyczny rysunek obrazujący potrójną dynamikę obsadzeń — jednorodny rozkład energii.	46
3.1 Schematyczne przedstawienie badanego układu: (a) Jednowymiarowy łańcuch spinów (otwarte warunki brzegowe); (b) Dwuwymiarowy układ atomów na sieci regularnej ograniczony obszarem kołowym o promieniu R .	52
3.2 Średnie przemieszczenie kwadratowe wzbudzenia od centralnego węzła w funkcji czasu.	54
3.3 Parametry dynamiczne dyfuzji w funkcji rozmiaru układu.	55
3.4 Parametry dynamiczne dyfuzji w funkcji siły nieporządku.	56
3.5 Zasięg dyfuzji w funkcji liczby węzłów.	57
3.6 Zasięg dyfuzji w funkcji siły nieporządku.	58
3.7 Asymptotyczne obsadzenie centralnego węzła w funkcji rozmiaru układu jednowymiarowego oraz asymptotyczne obsadzenie węzłów w funkcji numeru węzła.	59
3.8 Asymptotyczne obsadzenie węzłów w funkcji odległości od centralnego węzła w układzie dwuwymiarowym.	60
4.1 Schematyczny rysunek rozważanego układu — łańcuch jednorodnie rozmieszczonych spinów.	69
4.2 Mapa czasowej ewolucji funkcji korelacji dla każdego ze spinów w układzie, przesuwały się front falowy korelacji oraz ewolucja czasowa korelacji dla kilku wybranych węzłów.	78

4.3 Parametry dynamiczne ewolucji korelacji w funkcji odległości od centralnego spinu.	79
4.4 Mapa czasowej ewolucji funkcji korelacji dla każdego ze spinów w układzie, przesuający się front falowy korelacji oraz ewolucja czasowa korelacji dla kilku wybranych węzłów — układ ze słabym nieporządkiem lub brakiem nieporządku.	80
4.5 Mapa czasowej ewolucji funkcji entropii splątania dla każdego ze spinów w układzie, przesuający się front falowy entropii splątania oraz ewolucja czasowa entropii splątania dla kilku wybranych węzłów.	81
5.1 Średnie przemieszczenie kwadratowe ekscytynu od miejsca początkowego wzbudzenia w funkcji czasu — realistyczny układ kropek kwantowych.	90
5.2 Zależność parametrów dynamicznych od rozmiaru układu oraz siły nieporządku — realistyczny układ kropek kwantowych.	91
5.3 Poziom wysycenia średniego przemieszczenia kwadratowego w funkcji rozmiaru układu oraz siły nieporządku — realistyczny układ kropek kwantowych.	92
5.4 Mapa obsadzeń w funkcji odległości od początkowo wzbudzonej kropki kwantowej, zanik ekscytynu w układzie oraz intensywność fotoluminescencji — realistyczny układ kropek kwantowych.	93

Spis tablic

2.1 Analityczne formuły na obsadzenie w każdej z faz ruchu oraz czasy przejścia pomiędzy fazami dla różnych rozkładów prawdopodobieństwa energii.	48
3.1 Analityczne formuły określające parametry dynamiczne dyfuzji w dowolnym wymiarze przestrzennym, w funkcji rozmiaru układu.	65
5.1 Parametry materiałowe kropek kwantowych.	85

Dorobek naukowy

Lista prac autora

Prace bezpośrednio związane z rozprawą.

- (1) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Diffusion of excitations and power-law localization in strongly disordered systems with long-range coupling,
Physical Review B, t. **102**, str. 174203 (2020)
- (2) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Spread of Correlations in Strongly Disordered Lattice Systems with Long-Range Coupling,
arXiv:2106.08240, praca w recenzji w *Physical Review B*

Prace niezwiązane z rozprawą.

- (1) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Spin-orbit-induced hole spin relaxation in a quantum dot molecule: the effect of s-p coupling,
Journal of Physics: Condensed Matter, t. **31**, str. 355304 (2019)
- (2) Karol Kawa, Tilmann Kuhn, Paweł Machnikowski,
Coherence limitations in the optical control of the singlet-triplet qubit in a quantum dot molecule
arXiv:2202.13944, praca w recenzji w *Physical Review B*

Prezentacje konferencyjne

Konferencje międzynarodowe. Plakaty

- (1) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Exciton diffusion in a quantum dot ensemble,
5th International Workshop on the Optical Properties of Nanostructures — OPON 2018, Münster (Niemcy), 14-16 Lutego 2018 r.
- (2) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Exciton diffusion in a quantum dot ensemble,
47th International School & Conference on the Physics of Semiconductors
Szczaryk (Polska), 16-22 czerwca 2018 r.

- (3) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Exciton diffusion in a quantum dot ensemble,
20th International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices - IC-SNN2018
Madryt (Hiszpania), 23-27 lipca 2018 r.
- (4) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Spin-Orbit-Induced Hole Spin Relaxation in a Quantum Dot Molecule: the Effect of s-p Coupling,
48th International School & Conference on the Physics of Semiconductors
Szczaryk (Polska) 8-14 czerwca 2019 r.
- (5) Karol Kawa, Paweł Machnikowski
Spin-Orbit-Induced Hole Spin Relaxation in a Quantum Dot Molecule: the Effect of s-p Coupling
6th International Workshop on the Optical Properties of Nanostructures — OPON 2020,
Warszawa (Polska), 12-14 lutego 2020 r.
- (6) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Localization of an exciton in a quantum dot chain coupled by long-range power law coupling $\propto 1/r$,
International Conference on Nonlinear Optics and Excitation Kinetics in Semiconductors — NOEKS15
Münster (Niemcy), 14-17 września 2020 r.
Konferencja przeprowadzana zdalnie w formie wideokonferencji.
- (7) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Spread of Correlations in Highly Disordered System with Long-Range Coupling,
49th International School & Conference on the Physics of Semiconductors
Polska, 1-10 września 2021 r.
Konferencja przeprowadzana zdalnie w formie wideokonferencji.

Konferencje ogólnopolskie. Plakaty

- (1) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Dyfuzja ekscytynu w niejednorodnym zespole kropek kwantowych,
45. Zjazd Fizyków Polskich
Kraków, 13-18 września 2019 r.

Wygłoszone seminaria

- (1) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Dyfuzja ekscytynu w zespole kropek kwantowych,
Seminarium Katedry Fizyki Teoretycznej Coherence-Correlations-Complexity,

Politechnika Wrocławska,
24 stycznia 2018 r.

- (2) Karol Kawa, Paweł Machnikowski;
Relaksacja spinu dziury w podwójnej kropce kwantowej indukowana oddziaływaniem spin-orbita: efekt sprzężenia s-p pomiędzy kropkami,
Seminarium Katedry Fizyki Teoretycznej Coherence-Correlations-Complexity,
Politechnika Wrocławska,
22 stycznia 2020 r.
- (3) Karol Kawa, Paweł Machnikowski,
Spread of Correlations in Highly Disordered Lattice System with Long Range Interaction,
Seminarium Katedry Fizyki Teoretycznej Coherence-Correlations-Complexity,
Politechnika Wrocławska,
14 kwietnia 2021 r.

Staze naukowe

- (1) 8 października 2021 r. – 31 stycznia 2020 r.
Grupa naukowa prof. Tilmanna Kuhna,
Institut Für Ferskörpertheorie,
Westfalski Uniwersytet Wilhelma w Münster,
Staż finansowany przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej (NAWA),
Grant nr PPI/APM/2019/1/00085/U/00001.

Stypendia

- (1) 1 marca 2018 r. – 28 lutego 2021 r.,
Stypendium w grantie NCN BEETHOVEN
Kubity spinowe w sztucznych molekułach,
Kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Paweł Machnikowski,
Katedra Fizyki Teoretycznej,
Wydział Podstawowych Problemów Techniki,
Politechnika Wrocławska,
Grant nr 2016/23/G/ST3/04324.

Bibliografia

- [1] M. J. Stephen, „First-Order Dispersion Forces”, *The Journal of Chemical Physics*, t. 40, nr. 3, str. 669–673, 1964. DOI: 10.1063/1.1725188.
- [2] R. H. Lehmberg, „Radiation from an N -Atom System. I. General Formalism”, *Physical Review A*, t. 2, nr. 3, str. 883–888, 1970. DOI: 10.1103/PhysRevA.2.883.
- [3] A. A. Varfolomeev, „Coherent Effects in Spontaneous Emission by Unlike Atoms”, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, t. 59, str. 1702–1710, 1970.
- [4] P. W. Anderson, „Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”, *Physical Review*, t. 109, nr. 5, str. 1492–1506, 1958. DOI: 10.1017/CBO9781107415324.004.
- [5] K. Kawa, P. Machnikowski, „Diffusion of excitations and power-law localization in strongly disordered systems with long-range coupling”, *Physical Review B*, t. 102, nr. 17, str. 174203, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.174203.
- [6] A. Rodríguez, V. A. Malyshev, G. Sierra, M. A. Martín-Delgado, J. Rodríguez-Laguna, F. Domínguez-Adame, „Anderson Transition in Low-Dimensional Disordered Systems Driven by Long-Range Nonrandom Hopping”, *Physical Review Letters*, t. 90, nr. 2, str. 027404, 2003. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.027404.
- [7] N. Mott, W. Twose, „The theory of impurity conduction”, *Advances in Physics*, t. 10, nr. 38, str. 107–163, 1961. DOI: 10.1080/00018736100101271.
- [8] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, „Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions”, *Physical Review Letters*, t. 42, str. 673–676, 10 1979. DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.673.
- [9] G. Roati, C. D’Errico, L. Fallani, M. Fattori, C. Fort, M. Zaccanti, G. Modugno, M. Modugno, M. Inguscio, „Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate”, *Nature*, t. 453, nr. 7197, str. 895–898, 2008. DOI: 10.1038/nature07071.
- [10] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, „A simple approach to Anderson localization in one-dimensional disordered lattices”, *American Journal of Physics*, t. 72, nr. 2, str. 226–230, 2004. DOI: 10.1119/1.1593660.
- [11] L. S. Levitov, „Absence of Localization of Vibrational Modes Due to Dipole-Dipole Interaction”, *Epl*, t. 9, nr. 1, str. 83–86, 1989. DOI: 10.1209/0295-5075/9/1/015.
- [12] G. L. Celardo, F. Borgonovi, M. Merkli, V. I. Tsifrinovich, G. P. Berman, „Superradiance transition in photosynthetic light-harvesting complexes”, *Journal of Physical Chemistry C*, t. 116, nr. 42, str. 22105–22111, 2012. DOI: 10.1021/jp302627w.
- [13] M. Sarovar, A. Ishizaki, G. R. Fleming, K. B. Whaley, „Quantum entanglement in photosynthetic light-harvesting complexes”, *Nature Physics*, t. 6, nr. 6, str. 462–467, 2010. DOI: 10.1038/nphys1652.

- [14] M. Mohseni, P. Rebentrost, S. Lloyd, A. Aspuru-Guzik, „Environment-assisted quantum walks in photosynthetic energy transfer”, *Journal of Chemical Physics*, t. 129, nr. 17, str. 174106, 2008. DOI: 10.1063/1.3002335.
- [15] G. A. Álvarez, D. Suter, R. Kaiser, „Localization-delocalization transition in the dynamics of dipolar-coupled nuclear spins”, *Science*, t. 349, nr. 6250, str. 846–848, 2015. DOI: 10.1126/science.1261160.
- [16] A. D. Somoza, K. W. Sun, R. A. Molina, Y. Zhao, „Dynamics of coherence, localization and excitation transfer in disordered nanorings”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, t. 19, nr. 38, str. 25996–26013, 2017. DOI: 10.1039/c7cp03171h.
- [17] P. E. De Brito, E. S. Rodrigues, H. N. Nazareno, „Appearance of carrier propagations in the one-dimensional Anderson model with long-range hopping”, *Physical Review B*, t. 69, nr. 21, str. 2–10, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.214204.
- [18] R. Scheibner, E. G. Novik, T. Borzenko, M. König, D. Reuter, A. D. Wieck, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, „Sequential and cotunneling behavior in the temperature-dependent thermopower of few-electron quantum dots”, *Physical Review B*, t. 75, nr. 4, str. 1–4, 2007. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.041301.
- [19] Ł. Kozub Michał and Pawicki, P. Machnikowski, „Enhanced spontaneous optical emission from inhomogeneous ensembles of quantum dots is induced by short-range coupling”, *Physical Review B*, t. 86, nr. 12, str. 1–4, 2012. DOI: 10.1103/PhysRevB.86.121305.
- [20] F. Miftasani, P. Machnikowski, „Photon-photon correlation statistics in the collective emission from ensembles of self-assembled quantum dots”, *Physical Review B*, t. 93, nr. 7, str. 1–12, 2016. DOI: 10.1103/PhysRevB.93.075311.
- [21] B. Kloss, Y. Bar Lev, „Spin transport in a long-range-interacting spin chain”, *Physical Review A*, t. 99, nr. 3, str. 1–7, 2019. DOI: 10.1103/PhysRevA.99.032114.
- [22] F. A. De Moura, A. V. Malyshev, M. L. Lyra, V. A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, „Localization properties of a one-dimensional tight-binding model with nonrandom long-range intersite interactions”, *Physical Review B*, t. 71, nr. 17, str. 1–6, 2005. DOI: 10.1103/PhysRevB.71.174203.
- [23] K. Kawa, P. Machnikowski, „Spread of Correlations in Strongly Disordered Lattice Systems with Long-Range Coupling”, 2021. DOI: 10.48550/arxiv.2106.08240.
- [24] C. A. Müller, D. Delande, „Disorder and interference: Localization phenomena”, *Ultracold Gases and Quantum Information: Lecture Notes of the Les Houches Summer School in Singapore: Volume 91, July 2009*, t. 9780199603, 2011. DOI: 10.1093/acprof:oso/9780199603657.003.0009.
- [25] C. Guan, X. Guang, „A brief introduction to Anderson localization”, Massachusetts Institute of Technology, projekt studencki, 2019, <https://web.mit.edu/8.334/www/grades/projects/projects19/GuanChenguang.pdf>, [Zdanie; dostęp 21 czerwca 2022 r.]
- [26] F. Wegner, „Inverse participation ratio in $2+\epsilon$ dimensions”, *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, t. 36, nr. 3, str. 209–214, 1980. DOI: 10.1007/BF01325284.

- [27] K. Tankei, F. Takano, „Statistics of Electrical Resistance in One-Dimensional Disordered System”, *Journal of the Physical Society of Japan*, t. 55, nr. 10, str. 3516–3526, 1986. DOI: 10.1143/JPSJ.55.3516.
- [28] S. Chandrasekhar, „Stochastic problems in physics and astronomy”, 1943. DOI: 10.1103/RevModPhys.15.1.
- [29] Wikipedia, „Funkcje Bessela”, [Zdalnie; dostęp 21 czerwca 2021 r.]
- [30] „Green’s Functions and DOS for Some 2D Lattices”, *Graphene*, t. 10, str. 1–12, 2021. DOI: 10.4236/graphene.2021.101001.
- [31] Peter Hadley, „Table of Tigh-binding model”, <http://lamp.tu-graz.ac.at/~hadley/ss1/bands/tbtable/tbtable.html>, [Zdalnie; dostęp 29 czerwca 2021 r.]
- [32] D. Delande, „1d Anderson Model”, <https://chaos.if.uj.edu.pl/~delande/Lectures/?1d-anderson-model>, 39, [Zdalnie; dostęp 29 czerwca 2021 r.]
- [33] E. N. Economou, M. H. Cohen, „Localization in disordered materials: Existence of mobility edges”, *Physical Review Letters*, t. 25, nr. 20, str. 1445–1448, 1970. DOI: 10.1103/PhysRevLett.25.1445.
- [34] A. Rodríguez, A. V. Malyshev, F. Domínguez-Adame, „Quantum diffusion and lack of universal one-parameter scaling in one-dimensional disordered lattices with long-range coupling”, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, t. 33, nr. 15, 2000. DOI: 10.1088/0305-4470/33/15/102.
- [35] A. A. Markov, H. Liebmann, „Wahrscheinlichkeitsrechnung”. Leipzig, Berlin: B.G. Teubner, 1912.
- [36] J. Holtsmark, „Über die Verbreiterung von Spektrallinien”, *Annalen der Physik*, t. 363, nr. 7, str. 577–630, 1919.
- [37] L. Colmenarez, D. J. Luitz, „Lieb Robinson bounds and out of time order correlators in a long range spin chain”, *Physical Review Research*, t. 2, nr. 4, str. 43047, 2020. DOI: 10.1103/physrevresearch.2.043047.
- [38] E. H. Lieb, D. W. Robinson, „The finite group velocity of quantum spin systems”, *Communications in Mathematical Physics*, t. 28, nr. 3, str. 251–257, 1972. DOI: 10.1007/BF01645779.
- [39] D. W. Robinson, „Properties of propagation of quantum spin systems”, *The Journal of the Australian Mathematical Society. Series B. Applied Mathematics*, t. 19, nr. 4, str. 387–399, 1976. DOI: 10.1017/s03342700000001260.
- [40] H. Bragança, M. F. Cavalcante, R. G. Pereira, M. C. O. Aguiar, „Quench dynamics and relaxation of a spin coupled to interacting leads”, *Physical Review B*, t. 103, nr. 12, str. 1–10, 2021. DOI: 10.1103/physrevb.103.125152.
- [41] Y. Chougale, J. Talukdar, T. Ramos, R. Nath, „Dynamics of Rydberg excitations and quantum correlations in an atomic array coupled to a photonic crystal waveguide”, *Physical Review A*, t. 102, nr. 2, str. 1–16, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevA.102.022816.
- [42] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres, P. Schauß, T. Fukuhara, C. Gross, I. Bloch, C. Kollath, S. Kuhr, „Light-cone-like spreading of correlations in a quantum

- many-body system”, *Nature*, t. 481, nr. 7382, str. 484–487, 2012. DOI: 10.1038/nature10748.
- [43] T. Langen, R. Geiger, M. Kuhnert, B. Rauer, J. Schmiedmayer, „Local emergence of thermal correlations in an isolated quantum many-body system”, *Nature Physics*, t. 9, nr. 10, str. 640–643, 2013. DOI: 10.1038/nphys2739.
- [44] S. Hild, T. Fukuhara, P. Schauß, J. Zeiher, M. Knap, E. Demler, I. Bloch, C. Gross, „Far-from-equilibrium spin transport in heisenberg quantum magnets”, *Physical Review Letters*, t. 113, nr. 14, str. 1–5, 2014. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.147205.
- [45] P. Richerme, Z. X. Gong, A. Lee, C. Senko, J. Smith, M. Foss-Feig, S. Michalakakis, A. V. Gorshkov, C. Monroe, „Non-local propagation of correlations in quantum systems with long-range interactions”, *Nature*, t. 511, nr. 7508, str. 198–201, 2014. DOI: 10.1038/nature13450.
- [46] P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt, C. F. Roos, „Quasiparticle engineering and entanglement propagation in a quantum many-body system”, *Nature*, t. 511, nr. 7508, str. 202–205, 2014. DOI: 10.1038/nature13461.
- [47] V. Lienhard, S. De Léséleuc, D. Barredo, T. Lahaye, A. Browaeys, M. Schuler, L. P. Henry, A. M. Läuchli, „Observing the Space- and Time-Dependent Growth of Correlations in Dynamically Tuned Synthetic Ising Models with Antiferromagnetic Interactions”, *Physical Review X*, t. 8, nr. 2, str. 1–17, 2018. DOI: 10.1103/PhysRevX.8.021070.
- [48] J. Despres, L. Villa, L. Sanchez-Palencia, „Twofold correlations spreading in a strongly correlated lattice Bose gaz”, *Scientific Reports*, t. 9, str. 4135, 2019. DOI: 10.1038/s41598-019-40679-3.
- [49] T. Kuwahara, K. Saito, „Strictly Linear Light Cones in Long-Range Interacting Systems of Arbitrary Dimensions”, *Physical Review X*, t. 10, nr. 3, str. 31010, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevX.10.031010.
- [50] C. F. Chen, A. Lucas, „Finite Speed of Quantum Scrambling with Long Range Interactions”, *Physical Review Letters*, t. 123, nr. 25, str. 250605, 2019. DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.250605.
- [51] M. C. Tran, C. F. Chen, A. Ehrenberg, A. Y. Guo, A. Deshpande, Y. Hong, Z. X. Gong, A. V. Gorshkov, A. Lucas, „Hierarchy of Linear Light Cones with Long-Range Interactions”, *Physical Review X*, t. 10, nr. 3, str. 31009, 2020. DOI: 10.1103/PhysRevX.10.031009.
- [52] P. Hauke, L. Tagliacozzo, „Spread of correlations in long-range interacting quantum systems”, *Physical Review Letters*, t. 111, nr. 20, str. 1–6, 2013. DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.207202.
- [53] J. Schachenmayer, B. P. Lanyon, C. F. Roos, A. J. Daley, „Entanglement growth in quench dynamics with variable range interactions”, *Physical Review X*, t. 3, nr. 3, str. 1–16, 2014. DOI: 10.1103/PhysRevX.3.031015.
- [54] Z. Eldredge, Z. X. Gong, J. T. Young, A. H. Moosavian, M. Foss-Feig, A. V. Gorshkov, „Fast Quantum State Transfer and Entanglement Renormalization Using Long-Range Interactions”, *Physical Review Letters*, t. 119, nr. 17, str. 1–5, 2017. DOI: 10.1103/PhysRevLett.119.170503.

- [55] W. Rudin, „Functional Analysis”, ser. International series in pure and applied mathematics. McGraw-Hill, 1991.
- [56] G. Cario, J. Franck, „Über sensibilisierte Fluoreszenz von Gasen”, *Zeitschrift für Physik*, t. 17, nr. 1, str. 202–212, 1923. DOI: 10.1007/BF01328679.
- [57] R. H. Dicke, „Coherence in spontaneous radiation processes”, *Physical Review*, t. 93, nr. 1, str. 99–110, 1954. DOI: 10.1103/PhysRev.93.99.
- [58] T. Förster, „10th Spiers Memorial Lecture. Transfer mechanisms of electronic excitation”, *Discussions of the Faraday Society*, t. 27, nr. 0, str. 7–17, 1959. DOI: 10.1039/df9592700007.
- [59] M. Scheibner, T. Schmidt, L. Worschech, A. Forchel, G. Bacher, T. Passow, D. Hommel, „Superradiance of quantum dots”, *Nature Physics*, t. 3, nr. 2, str. 106–110, 2007. DOI: 10.1038/nphys494.
- [60] F. V. De Sales, S. W. Da Silva, J. M. Cruz, A. F. Monte, M. A. Soler, P. C. Morais, M. J. Da Silva, A. A. Quivy, „Indications of amplified spontaneous emission in the energy transfer between InAs self-assembled quantum dots”, *Physical Review B*, t. 70, nr. 23, str. 1–5, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.235318.
- [61] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, „Photons and Atoms: Introduction to Quantum Electrodynamics”. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 1997.
- [62] H. P. Breuer, F. Petruccione, „The theory of open quantum systems”. Great Clarendon Street: Oxford University Press, 2002.
- [63] C. G. van der Laan, N. M. Temme, „Calculation of Special Functions: The Gamma Function, the Exponential Integrals and Error-Like Functions”, ser. CWI Tract. Amsterdam: Stichting Mathematisch Centrum, Centrum voor Wiskunde en Informatica, 1984, t. 10, str. iv+231.

Podziękowania

Przez ostatnie pięć lat studiów doktoranckich, podczas których pracowałem nad niniejszą rozprawą, dane mi było być w relacji z wieloma ludźmi, bez których nie byłbym tym, czym jestem. W tym miejscu chcę podziękować przynajmniej niektórym.

Na pierwszym miejscu dziękuję moim Rodzicom za wszelkie wsparcie. Również w sposób szczególny pragnę podziękować mojemu Promotorowi, profesorowi Pawłowi za wszelką pomoc, o której w szczegółach trzeba by wiele pisać, za życzliwość i wiarę w ludzi. Dziękuję kolegom fizykom, za dobre rozmowy, te naukowe i te daleko nienaukowe. Krzysztofowi, Pawłowi, Michałowi i Adamowi za serdeczne przyjęcie do grupy. Adamowi (jeszcze raz), Mateuszowi (tj. Prymusowi), Bartłomiejowi, Norbertowi, Maksowi z Edzią, Arkowi, Bartoszowi i Wojtkowi za stworzenie cudownej atmosfery w pracy. Dziękuję wszystkim młodym fizykom, których dane mi było poznać, dziękuję kolegom zza ściany, młodemu pokoleniu doktorantów: Sahnawazowi, Maksowi, Gosi oraz kolegom ze studiów: Zosi, Kasi, Asi, Michałowi, Witkowi, Tomkowi *et al.* Dziękuję tym, których dane mi było poznać podczas stażu w Münster, Profesorowi Tilmannowi, Danielowi W., Danielowi G, Thilo, Kevinowi, Doris i Maxowi, zespołowi *The Newtones*.

Na koniec pragnę podziękować mojemu Bratu i przyjaciółom: Asi, Marcinowi, Radkowi i Patce, Grzesiowi i Monice. Marysi i Adrianowi, Asi i Edgardowi, Marcinowi, Pauli, Iwonie i Łukaszowi, Eli i Piotrowi oraz najlepszym sąsiadkom Agacie i Wiktorii.

Wasz Karol