بنام یگانهٔ هستی

دانشگاه الزهراء (س)

دانشکده علوم‌پایه

پایان‌نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی‌ارشد

رشته‌ی فیزیک

عنوان

خواص آماری حلقه‌های هم‌تراز حالت‌های جایگزیده در امواج الاستیک

استاد راهنما

دکتر امیرعلی مسعودی

استاد مشاور

دکتر ایوب اسماعیل‌پور

دکتر محمدرضا رحیمی‌تبار

دانشجو

زینب مختاری اصل

آذر ۱۳۸۸

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم

قدردانی و تشکر

در اینجا لازم می‌دانم از زحمات و راهنمایی‌های اساتید گرامی خود، آقای دکتر مسعودی ، آقای دکتر اسماعیل‌پور و آقای دکتر رحیمی‌تبار تشکر کنم. همچنین از تمام دوستانی که در این مدت همواره مورد لطف شان بودم سپاسگزارم.

چکیده

در این پایان‌نامه هدف، بررسی خواص آماری حلقه‌های هم‌تراز در حالت‌های جایگزیده و بحرانی امواج کشسان می‌باشد. ابتدا جایگزیدگی امواج در حضور بی‌نظمی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در این کار از یک مدل ساده‌ی یک بعدی آغاز می‌کنیم. سپس آن را برای دو بعد تعمیم می‌دهیم. در ابعاد بالاتر از روش شبیه‌سازی عددی برای مطالعه‌ی این امواج استفاده می‌شود. با استفاده از محاسبات عددی ویژه مقادیر و ویژه بردارهای امواج الاستیک را در دو بعد بدست می آوریم. با استفاده از الگوریتم هوشن – کوپلمان حلقه‌های تراز صفر رنگ زده می‌شود. بنظر می‌رسد این حلقه‌ها دارای خواص فراکتالی باشند.

رفتار مقیاسی حلقه‌ها و خوشه‌های هم‌ارتفاع را با محاسبه‌ی بعد فراکتالی آنها، مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

فهرست

۱ مقدمه

۲ جایگزیدگی در سیستم کشسان یک بعدی با چگالی تصادفی

۱.۲ مقدمه ۱۳

۲.۲ جایگزیدگی در سیستم‌های یک بعدی ۱۵

۳.۲ رشد نمایی ویژه توابع، جایگزیدگی و حدس برلند ۱۷

۴.۲ چگالی حالات در سیستمهای یک بعدی ۲۱

۵.۲ هدایت و نماهای لیاپانوف (فرمول $Landauer$) ۲۳

۶.۲ بسط برای پتانسیل کاتوره‌ای ضعیف ۲۷

۳ مطالعه‌ی عددی جایگزیدگی امواج کشسان در دو بعد

۱.۳ مقدمه ۳۴

۲.۳ زنجیره‌ی جرم وفنر ۳۵

۳.۳ معادله موج گسسته ۳۶
۴.۳ آمار ترازهای انرژی ۴۰

۴ بررسی آمار منحنی‌های هم‌ارتفاع

۱.۴ مقدمه ۴۸
۲.۴ خود–تشابهی ۴۹
۳.۴ بعد فراکتال ۵۰
۴.۴ خود – مقارب ۵۱
۵.۴ بعد فراکتالی حلقه‌های هم ارتفاع ۵۲
۶.۴ الگوریتم $Hoshen - Kopelman$ ۵۵

۵ نتیجه‌گیری

۶ پیوست

پیوست الف : مبانی ریاضی ماتریس‌های کاتوره‌ای ۶۱
پیوست ب: الگوریتم $Hoshen - Kopelman$ ۶۵
پیوست ج: نظریه‌ی ماتریس‌های تصادفی و آمار ترازهای انرژی ۶۷
مراجع ۷۵

چکیده‌ی انگلیسی

فصل اول

مقدمه

نظریه‌ی الکترونی خواص جامدات بی‌نظم تقریباً از دهه ۱۹۵۰ مورد توجه محققین بوده است. تحقیقات در این زمینه در دهه ۱۹۸۰ رشد قابل توجهی کرده و امروزه نیز مورد توجه بسیاری از پژوهشگران است. به این دلیل که از یک طرف روشهای نظری جدیدی بوجود آمده و همچنین کامپیوترهای پیشرفته ای وارد تحقیقات شده‌اند. از سوی دیگر با پیشرفت علم نانو روشهای آزمایشگاهی جدید امکان آزمودن نتایج نظری را فراهم کرده است. مساله جایگزیدگی حالتهای کوانتومی در یک محیط بی‌نظم یکی از نمونه‌هایی است که پیشرفت چشمگیری در آن حاصل شده است. بیشترین نمود تجربی پدیده جایگزیدگی که بعنوان مثال خواص حالتهای الکترونی سیستمهای کوانتومی کاتوره‌ای را توصیف می‌کند در خواص ترابردی سیستم‌های حالت جامد مشاهده شده است. توابع موج تک ذره‌ای در سیستمهای کوانتومی بی‌نظم در دمای صفر مطلق بصورت نمایی جایگزیده می‌شوند [۱] یعنی دامنه موج در فضا بصورت نمایی افت می‌کند.

اولین بار در سال ۱۹۵۸ اندرسون [۱] مساله جایگزیدگی را در مورد نفوذ کوانتومی مورد بحث قرار داد. وی مساله را فرمول بندی کرده و اولین تخمین کمی برای شدت پتانسیل کاتوره‌ای را در سیستم سه بعدی ارائه داد که به ازای آن موج از شبکه کاتوره‌ای واقعی نفوذ نمی‌کند[۱]. بنابراین در سه بعد یک مقدار بحرانی برای شدت

[۱] P.W.Anderson

بی‌نظمی وجود دارد که به ازای آن گذار از حالت عایق به حالت فلزی رخ می‌دهد. این گذار در سیستمهای بی‌نظم به گذار اندرسون معروف است.

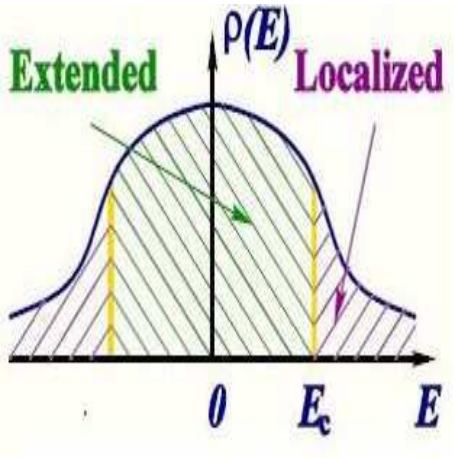
در سال ۱۹۶۱ مات و توز بصورت ریاضی ثابت کردند که در یک بعد در حضور بی‌نظمی تمام حالت‌های الکترونی جایگزیده‌اند[۲]. این اثر برای سیستمهای دو بعدی نیز وجود دارد یعنی همه حالتهای الکترونی در حضور کوچکترین بی‌نظمی جایگزیده‌اند[۱]. نکته مهمی که باید دانست این است که پدیده جایگزیدگی به ابعاد سیستم بستگی دارد[۱و۲].

علت رفتار نارسانایی در مقادیر بزرگ بی نظمی آن است که الکترونها در افت و خیزهای پتانسیل حبس (جایگزیده) می‌شوند. این پدیده ذاتاً کوانتومی نیست. به این مفهوم که در سیستمهای کلاسیک از قبیل پرکولاسیون [۷] و مدل لورنتس کلاسیک [۸] اثر مشابهی دیده شده بود.

این مدلها نیز گذار از حالت پخشی به حالت جایگزیده را نشان می‌دهند که شباهت بسیاری به رفتار مدل اندرسون دارد. با توجه به این مدلها جایگزیدگی لزوماً نیاز به پتانسیل جاذب ندارد بلکه از حبس شدن ذره در ناحیه‌ی با چگالی بالای پراکنده‌سازها ناشی می‌شود. اگر پتانسیل نرم باشد با کاهش پراکنده‌سازها و همچنین با افزایش انرژی ذرات می‌توان این اثر را تضعیف کرد ویا از بین برد. در مورد کوانتومی یک اثر غیرعادی مشاهده می‌شود وآن این است که اگر بی‌نظمی خیلی بزرگ نباشد انرژی آستانه‌ای (E_c) وجود دارد که حالت‌های جایگزیده و گسترده را از هم جدا می‌کند که با تنظیم انرژی فرمی در عبور از این انرژی آستانه می‌توان فلز و یا عایق داشت. این انرژی آستانه را لبه‌ی تحرک [۲] می‌نامند [۹] شکل (۱—۱) را ببینند.

در سال ۱۹۷۹ آبراهامز و همکاران (از جمله خود اندرسون) با استفاده از مفاهیم نظریه‌ی مقیاسی پیش‌بینی کردند که در $d = 2$ نیز با بی‌نظمی به دلخواه ضعیف تمام حالتها جایگزیده می‌شوند [۱۰] همانطور که در $d = 1$ هستند. بر خلاف ماهیت اصلی جایگزیدگی اندرسون این پدیده کاملاً کوانتومی است و در مدل لورنتس مانسته‌ای ندارد. می‌توان به این پدیده به عنوان یک اثر تداخلی نگاه کرد.(۱۱۹۸۳ و ۱۹۸۴ برگمن [۱۱]). بر خلاف مورد یک بعدی اثر بی‌نظمی ضعیف در $d = 2$ برای دماهای پایین به شکل لگاریتمی است. پیش‌بینی

[۲] Mobility Edge



شکل (۱—۱) چگالی حالات مدل اندرسون سه بعدی [۹].

کلیدی این بود که در ورقه‌های فلزی نازک مقاومت الکتریکی در دماهای پایین باید با کاهش دما بطور لگاریتمی افزایش یابد این پدیده به جایگزیدگی ضعیف معروف است. مشاهده تجربی چنین رفتاری تاییدی بر این نظریه بود (۱۹۷۹ دلان —اوشراف [۱۲] و ۱۹۸۴ برگمن). هر چند بعداً مشخص شد که تطابق مشاهده شده در برخی موارد تصادفی بوده است چون اثرات برهم کنشی که در نظریه‌ی جایگزیدگی ضعیف از آنها چشم‌پوشی شده‌است مورد توجه نبوده‌اند.

توافق نتایج تجربی و تئوری قانع کننده بود و باعث شده‌بود که نزدیک به دو دهه مساله‌ی وجود یا عدم وجود حالت رسانایی در دو بعد حل شده فرض شود.

اما گذر زمان به ما آموخته که یک دیدگاه پذیرفته شده لزوماً همیشه پابرجا نخواهد ماند. در سال ۱۹۸۴ فینکلشتاین [۱۳] و کاستانی و همکاران [۱۴] رقابت بی‌نظمی و اندرکنش را مطالعه کردند و نشان دادند که در حد بی‌نظمی ضعیف و برهمکنش قوی یک سیستم دو بعدی با کاهش دما می‌تواند رسانش محدود داشته باشد. اما نتیجه‌گیری چندان قطعی نبود چون محدوده‌ی اعتبار آن رژیم فلزی را در بر نمی‌گرفت و به دلیل امکان وجود فلز دو بعدی جدی گرفته نشد. تا اینکه از تحلیل نتایج تجربی گلد در سال ۱۹۹۱ نتیجه گرفت که در نمونه‌های تمیز گذار فاز عایق به فلز باید وجود داشته باشد [۱۵]. کارهای تجربی بعدی نیز صحت این گفته را تایید کردند.

از طرفی با توجه به جایگزیدگی الکترون به عنوان موج مادی می‌توان پیش‌بینی کرد که چنین پدیده‌ای برای امواج کلاسیک نیز قابل مشاهده است. از اوایل دهه‌ی ۱۹۸۰ توجه زیادی به جستجوی اثرات مشابهی برای

امواج کلاسیک جلب شد. روشها و ابزارهای یافته شده برای مطالعه‌ی جایگزیدگی الکترون در امواج کلاسیک نیز به کار بسته شد. انگیزه‌ی دنبال کردن این موضوع را می‌توان در دو چیز عمده دانست اول اینکه در عمل انتشار امواج در محیط‌های تصادفی که می‌توان انتظار وقوع جایگزیدگی داشت از اهمیت بنیادی برخوردار است و دوم اینکه با توجه به اینکه امواج کلاسیک برهم‌کنشی با یکدیگر ندارند می‌توانند کاندیدای مناسبی برای مطالعه‌ی جنبه‌های مختلف جایگزیدگی اندرسون باشند علاوه بر این تنظیم شرایط آزمایش در مقیاسهایی که این امواج منتشر می‌شوند آسانتر از مقیاسهای متناظر برای الکترون است. در میان امواج کلاسیک امواج کشسان حوزه‌ی کاربرد وسیعتری دارند: در مقیاس ریز به عنوان برانگیختگیهای فونونی داخل بلور و در مقیاس بزرگ به شکل امواج زلزله در داخل زمین. از طرفی وجود قطبش‌های مختلف در انتشار این امواج و امکان تبدیل قطبش‌ها به یکدیگر در هنگام پراکندگی مطالعه آنها را دشوار می‌کند اما به همین دلیل می‌توان انتظار داشت که انتشار و جایگزیدگی این امواج محتوای غنی‌تری داشته باشند. بخصوص می‌توان سوال مهمی مطرح کرد و آن اینکه آیا وجود درجات آزادی بیشتر بخاطر برداری بودن ماهیت این امواج می‌تواند تصویر جایگزیدگی را در ابعاد مختلف تغییر دهد؟

علاوه بر اهمیت نظری از دیدگاه کاربرد عملی نیز انگیزه‌های متعددی برای مطالعه‌ی انتشار امواج کشسان وجود دارد. شناخت چگونگی انتشار این امواج به ویژه در محیط‌های ناهمگن مانند صخره اهمیت بنیادی در مسایل دیگری مانند امواج زلزله، انفجارهای زیرزمینی، شناخت مورفولوژی مخازن نفتی و گاز، اقیانوس شناسی، علوم مواد [۱۶] و غیره دارد. به عنوان مثال انتشار و انعکاس امواج لرزه‌ای نه تنها در تخمین محتوای نفت وگاز ودسترسی به مورفولوژی داخل آن بکار می‌رود بلکه می‌توان بوسیله‌ی آن ساختارهای مختلف را در اعماق زمین تصویر کرد[۱۷].

گذار جایگزیدگی از دید فیزیک آماری یک گذار فاز پیوسته است. پله‌ی اول در گسترش نظریه‌ی گذار فاز در مسئله جایگزیدگی، یافتن پارامتر نظم مربوطه است. در مورد الکترونها نشان داده شده است که رسانش تالس گزینه‌ی خوبی برای چنین پارامتری است. چون این کمیت هم در رژیم فلزی و هم در رژیم عایق قابل تعریف است و از طرفی اثر شرایط مرزی نیز اطلاعات خوبی از رفتار آن در اندازه‌های بزرگتر بدست می‌دهد.

$$g_T = \frac{e^2}{\hbar}\frac{\langle \delta E \rangle}{\Delta E} \tag{۱.۱}$$

که در آن δE حساسیت تراز انرژی به تغییر شرایط مرزی از دوره‌ای به پاد دوره‌ای و Δ فاصله‌ی متوسط ترازها است. رسانش لانداور g_L و رسانش اکونومو و سوکولیس g_{ES} نیز معادل با این کمیت است و به شکل زیر تعریف می‌شوند و می‌توانند پارامتر نظم مناسبی برای گذار فاز باشند:

$$g_L = \frac{e^2}{\hbar}\frac{T}{1-T} \tag{۱.۲}$$

و

$$g_{ES} = \frac{e^2}{\hbar}T \tag{۱.۳}$$

که در آن T ضریب عبور است.

فرض اساسی نظریه‌ی مقیاسی این است که وقتی اندازه‌ی سیستم به اندازه‌ی کافی از تمام مقیاس طولهای طبیعی آن بزرگ‌تر است، بستگی رسانش به اندازه، فقط به مقدار رسانش وابسته است:

$$\frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \beta(g) \tag{۱.۴}$$

حال می‌توان رفتار حدی تابع $\beta(g)$ را از استدلالهای فیزیکی استنتاج کرد. در حد رسانش بالا که انتظار داریم رسانش اهمی باشد خواهیم داشت:

$$g = \sigma L^{d-2} \tag{۱.۵}$$

که با قرار دادن در (۱.۴) بدست می‌آوریم:

$$\lim_{g\to\infty} \beta(g) = d-2 \tag{۱.۶}$$

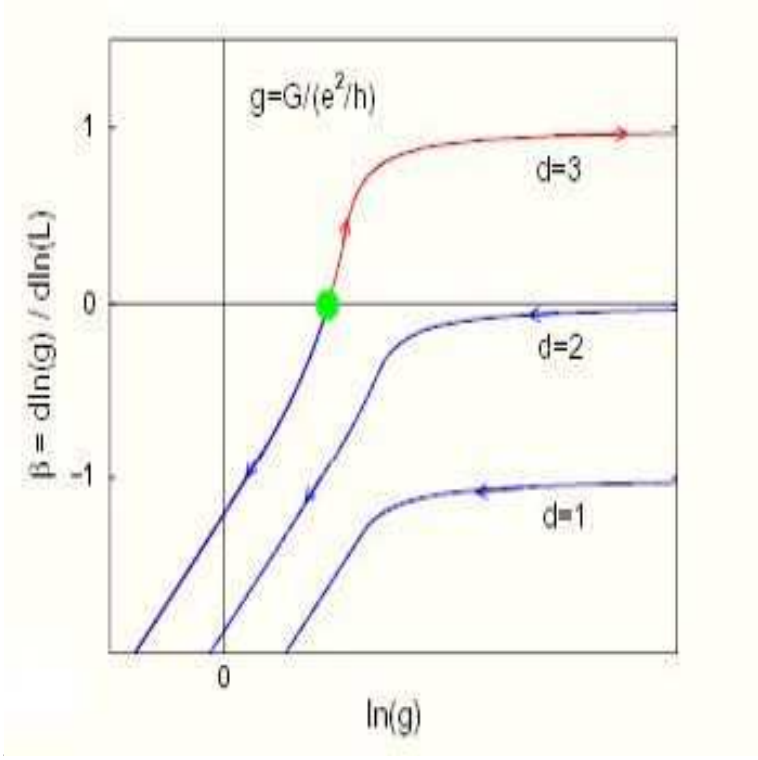
در حد مقابل یعنی رسانش کم، $g << 1$، که انتظار داریم جایگزیدگی نمایی داشته باشیم رفتار رسانش به شکل زیر است:

$$g \approx e^{-2L/\lambda} \tag{۱.۷}$$

بنابراین داریم:

$$\beta(g) = -\frac{2L}{\lambda} = \ln g \tag{۱.۸}$$

حال می‌توان حد فاصل این دو حد را درونیابی کرد. اگر فرض کنیم تابع یکنواست این کار به آسانی قابل انجام است. هر چند این فرض به‌طور دقیق قابل اثبات نیست ولی دلیل فیزیکی برای رد آن وجود ندارد. بنابراین با وصل کردن دو حد، تابع $\beta(g)$ چنانکه در شکل (۱—۲) نشان داده شده است رفتار می‌کند.



شکل(۱—۲)تابع $\beta(g)$ برای ابعاد $d = 1, 2, 3$. به نقطه بحرانی در $d = 3$ دقت کنید [۳۹].

شکل تابع $\beta(g)$ پیامدهای مهمی دربردارد. می‌بینیم که مقدار تابع به ازای $d \leq 2$ همیشه منفی است. بنابراین در

حد ترمودینامیک رسانش به صفر میل می‌کند. پس در $d \leq 2$ گذار فاز —مستقل از مقدار بی‌نظمی — وجود ندارد و تمام حالتها جایگزیده هستند. برای $d > 2$ $(d = 3)$، یک نقطه‌ی بحرانی g_c وجود دارد به‌طوری که

$$\beta(g_c) = 0 \qquad (۱.۹)$$

در این نقطه تابع $\beta(g)$ تغییر علامت می‌دهد. اگر از یک مقدار بزرگتر از g_c شروع کنیم در حد ترمودینامیک به مقدار رسانش می‌رسیم که رژیم فلزی است. اگر از یک مقدار کوچکتر از g_c شروع کنیم دوباره به رژیم عایق می‌رسیم. بنابراین نظریه مقیاسی [۱۱]، که مهمترین دستاورد در شناخت گذار اندرسون بوده است، بعد بحرانی پایین را $d = 2$ پیش‌بینی می‌کند.

روشهای متعددی برای مطالعه‌ی مسئله‌ی جایگزیدگی در سیستم‌های یک بعدی شناخته شده‌است. بیشتر اثباتهای دقیق ریاضی در مسئله‌ی جایگزیدگی در سیستم یک بعدی امکان‌پذیر هستند وبه آسانی قابل تعمیم به ابعاد بالاتر نمی‌باشند. ولی چنانچه در اغلب موارد اتفاق می‌افتد مطالعه‌ی سیستم‌های یک بعدی تنها در جهت شناخت سیستم‌های فیزیکی یک بعدی نیست بلکه چنین مطالعاتی به نوعی مانند دریچه‌ای برای پرداختن به مسائل جدی‌تر در ابعاد بالاتر از یک بعد نیز هستند.

چنانکه اشاره کردیم مفهوم حالت جایگزیده توسط اندرسون توسعه یافته‌ا ست. رویکرد اولیه‌ی وی بر اساس کمیتی به نام احتمال بازگشت [۳] بوده است. او نشان داد که اگر یک سیستم کوانتومی به اندازه‌ی کافی بی‌نظم باشد، حالتها به گونه‌ای هستند که در حد زمانهای طولانی، احتمال بازگشت به نقطه‌ی معینی (به عنوان مثال نقطه شروع انتشار)، مقدار محدود غیر صفر است. به عبارتی پخش اتفاق نمی‌افتد. عدم حضور پخش باعث می‌شود که این حالتها در ناحیه‌ی محدودی از فضا جایگزیده باشند. احتمال عبور بطور نمایی افت می‌کند.

مقیاس طولی که این افت در آن اتفاق می‌افتد، طول جایگزیدگی [۴]نامیده می‌شود. محاسبه دقیق این کمیت جز در موارد خاصی دشوار است. بخصوص در ابعاد بالاتر از یک بعد محاسبه‌ی آن معمولاً به روش عددی امکانپذیر است. کمیت متناظری در مسئله‌ی آشوب و در ضرب ماتریس‌های تصادفی ظاهر می‌شود که به نمای

[۳] Return Probability

[۴] Localization Length

لیاپانوف [۵] معروف است. در مسئله جایگزیدگی نمای لیاپانوف عکس طول جایگزیدگی است.

در سال ۱۹۶۱ ، مات [۶] و توز [۷] پیش‌بینی کردند[۲] که تمام حالتهای الکترونی در یک بعد جایگزیده هستند. برای اثبات این حدث، برلند [۸] معادله شرودینگر در یک بعد را با اختلال‌های دلتای دیراک در مکان‌های تصادفی، مطالعه کرد[۳] و نشان داد که در حد انرژیهای بالا پوش تابع موج با دور شدن از یک سر که در آنجا شرایط مرزی روی تابع موج اعمال شده است، بطور نمایی رشد می‌کند و این رشد نمایی را به جایگزیدگی نمایی تابع موج نسبت داد. ارتباط این رشد نمایی به خواص جایگزیدگی، که به حدس برلند نیز معروف است، اساس ارتباط مسئله‌ی جایگزیدگی و نظریه‌ی ضرب ماتریسهای تصادفی [۹] است. پس از آن، رشد نمایی چنین پاسخهایی در سیستم یک بعدی بی‌نظم، توسط ماتسودا [۱۰] و ایشی [۱۱][۱۸]، با استفاده از قضییه‌ی فورشتنبرگ [۱۲] [۱۹]، اثبات شد.

برای توصیف کمّی، به پاسخهای مدل اندرسون در یک بعد می‌پردازیم. مسئله‌ی ویژه‌مقداری مدل اندرسون در یک بعد به معادله‌ی بازگشتی زیر منجر می‌شود:

$$\varepsilon_n \psi_n + \psi_{n+1} + \psi_{n-1} = E\psi_n \qquad (۱.۱۰)$$

که در آن ε_i انرژی پتانسیل در نقطه‌ی n و E انرژی ویژه است. در پیروی از برلند می‌خواهیم رفتار مجانبی ψ_n را در n های بزرگ، برای یک انرژی مشخص، مطالعه کنیم. با انتخاب یک شرط مرزی در یک طرف بطوری که$\psi_0^2 + \psi_1^2 \neq 0$ باشد و با استفاده از معادله‌ی بازگشتی، تمام ψ_n ها قابل تعیین هستند. معادله‌ی فوق به شکل ماتریسی زیر قابل بیان است:

---

[۵] Lyapunov Exponent
[۶] N.F.Mott
[۷] W.D.Twose
[۸] R.E.Borland
[۹] PRM
[۱۰] H.Matsuda
[۱۱] K.Ishii
[۱۲] H.Furshenberg

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \qquad (۱.۱۱)$$

که در آن ماتریس گذارT_n عبارتست از:

$$T_n = \begin{pmatrix} E-\varepsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (۱.۱۲)$$

پاسخ در فاصله‌ی دلخواه از نقطه‌ی شروع بر حسب ضرب ماتریسهای گذار $T_nT_{n-1}...T_1$ و بردار اولیه‌ی $(\psi_1 \quad \psi_0)^T$داده خواهد شد. بنابراین با داشتن مقادیر ویژه بردار در مکان‌های صفرم و اول از مدل یک بعدی می‌توان ویژه بردار را در مکان‌های بعدی نیز بدست آورد.

در مکانیک کوانتومی دیده‌ایم که دو گونه طیف انرژی برای یک ذره در پتانسیل $V(x)$ ، می‌توان داشت. طیف پیوسته و طیف گسسته. طیف گسسته که ویژگی یک سیستم کوانتومی است زمانی اتفاق می‌افتد که ذره مقیّد به پتانسیلِ داده شده باشد. از خواص مهم یک حالت مقیّد این است که تابع موج مربوط به آن باید انتگرال‌پذیر مجذوری باشد:

$$\int |\psi(x)|^2 dx < \infty \qquad (۱.۱۳)$$

در یک پتانسیل بی‌نظم با پهنای محدود انتظار داریم با متوسط گیری، یک طیف پیوسته بدست آوریم. از طرفی می‌دانیم که یک حالت جایگزیده، انتگرالپذیر مجذوری است. یعنی شرط (۱.۱۳) را برآورده می‌کند. ظاهراً با یک تناقض مواجه هستیم چون با اینکه توابع موج انتگرالپذیرند اما طیف مربوط به آنها، پیوسته است. در واقع تناقضی در کار نیست بلکه باید تقسیم‌بندی طیف انرژی تعمیم داده شود. به این معنی که طیف انرژی می‌تواند علاوه بر بخش پیوسته و گسسته، بخش دیگری نیز داشته باشد که آن را بخش تکین[۱۳] می‌نامیم. هر چند این تکینگی در کمیتهای متوسط‌گیری شده ظاهر نمی‌شود.

[۱۳] Singular

برای مطالعه‌ی خواص طیفی، چگالی حالت‌ها[۱۴]، از کمیتهای مناسب و مورد علاقه در چهارچوب سیستمهای نامنظم است. چنانچه در بالا ذکر شد، متوسط آنسامبلی چگالی حالت‌ها در یک سیستم بی‌نظم، تکینگی در بر نخواهد داشت.

پدید آمدن حالت‌های جایگزیده به شکل دیگری در چگالی حالات اثر می‌گذارد. با افزودن بی‌نظمی به سیستم منظم، نوار انرژیهای مجاز، قدری گسترش می‌یابد. یا بطور مشخص، پهن می‌شود. دنباله‌ی نمایی که چگالی حالتها در نزدیکی انتهای نوار، پیدا می‌کند، معروف به دنباله‌ی لیفشیتز[۱۵] است. به عبارت دیگر، این دنباله‌ی نمایی می‌تواند رد پای حالتهای جایگزیده محسوب شود. به دلیل اهمیت این پدیده سعی می‌کنیم استدلال ساده‌ای برای بوجود آمدن آن، در مدل اندرسون، ارائه دهیم.

مدل اندرسون را در سه بعد و در شبکه‌ی مکعبی در نظر بگیرید:

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle \langle i| + t \sum_{\langle ij \rangle} |i\rangle \langle j| \qquad (۱.۱۴)$$

در پیروی از کار اولیه‌ی لیفشیتز [۲۰]، یک ترکیب با دو نوع اتمA و B به ترتیب با انرژیهای $\varepsilon_A, \varepsilon_B$ در نظر می‌گیریم. بدون از دست دادن کلیت مسئله می‌توانیم فرض کنیم $\varepsilon_A = 0$ و $\varepsilon_B < 0$. اتمهای A یک شبکه منظم تشکیل می‌دهند و اتمهای B به شکل ناخالصی با چگالی c در شبکه به جای اتمهای A قرار می‌گیرند بنابراین تابع توزیع احتمال ε_i عبارتست از :

$$P(\varepsilon_i) = c\delta(\varepsilon_i - \varepsilon_B) + (1-c)\delta(\varepsilon_i) \qquad (۱.۱۵)$$

این مدل، معروف به مدل آلیاژ دوتایی [۱۶] است و مدل بسیار معمول در مطالعه‌ی سیستمهای بی‌نظم است. نوار انرژی مربوط به شبکه منظم (همه‌ی اتمهای نوع A) انرژیهای $-6t \leq E \leq 6t$ را شامل می‌شود. با توجه به انتخاب ε_i ها روشن است که حدّ بالای نوار بدون تغییر می‌ماند و حدّ پایین آن به $E_- = -6t + \varepsilon_B$ انتقال پیدا

[۱۴] Density of States(DOS)

[۱۵] Lifshitz tail

[۱۶] Binary Alloy

می‌کند. انرژی E_- مربوط به حالتی است که تمام اتمها از نوع B باشند. این تنها پیکربندی مربوط به E_- است و این باعث می‌شود در حدّ ترمودینامیک چگالی حالت‌ها در این انرژی صفر شود. می‌توانیم رفتار $\rho(E)$ را در نزدیکی E_- تعیین کنیم. حالت‌هایی که در بازه‌ی انرژی $(E_-, E_- + \delta E)$ واقعند، برای اینکه انرژی نزدیک به E داشته باشند در ناحیه‌هایی که در خوشه‌هایی از اتمهای B وجود دارد، جایگزیده می‌شوند و در داخل خوشه‌ها امواج ایستاده تشکیل می‌دهند. با فرض اینکه تابع موج مورد نظر، عدد موج k داشته باشد انرژی آن برابر است با :

$$E = -6t + \varepsilon_B + tk^2 = E_- + tk^2 \qquad (۱.۱۶)$$

کمترین اختلاف انرژی، مربوط به کوچکترین k است. کوچکترین مقدار k بستگی به اندازه‌ی خوشه دارد. در سه بعد داریم $k_{\min} \propto V^{-\frac{3}{2}}$

که در آن V حجم خوشه یا به عبارتی تعداد اتمهای آن است. با استفاده از رابطه‌ی (۱.۱۶) می‌توان حجم خوشه را بر حسب $\delta E = E - E_-$ بیان کرد:

$$V \propto (\delta E)^{-\frac{3}{2}} \qquad (۱.۱۷)$$

و با استفاده از احتمال ساخته شدن چنین خوشه‌ای که برابر است با c^V، می‌توان چگالی حالت‌ها را به شکل زیر نوشت :

$$\rho(E) \propto \exp\{a \ln(c)(\delta E)^{-\frac{3}{2}}\} \qquad (۱.۱۸)$$

که در آن a ضریب عددی ثابت و مثبت است و به شکل خوشه بستگی دارد. چنانکه دیدیم حالت‌هایی که دنباله‌ی نمایی $\rho(E)$ را می‌سازند، حالتهای جایگزیده در اطراف خوشه‌های ناخالصی هستند. در بعضی موارد چگالی حالت‌ها برای یک سیستم بی‌نظم بطور دقیق قابل محاسبه است. برای یک زنجیره‌ی جرم و فنر در حضور ناخالصی (جرم‌های تصادفی و ثابت فنرهای تصادفی) این کمیت اولین بار توسط دایسون [۳۰] مورد

مطالعه قرار گرفته و به صورت دقیق محاسبه شده است. در اکثر موارد برای محاسبه این کمیت از روشهای عددی استفاده می‌شود.

فصل دوم

جایگزیدگی در سیستم کشسان یک بعدی با چگالی تصادفی

۱.۲ مقدمه

در یک سیستم الکترونی یک بعدی هامیلتونی بطور کلی شامل سه نوع برهم‌کنش می‌باشد: برهم‌کنشهای یون — یون ، الکترون — الکترون و الکترون — یون. چون حرکت یونها در دماهای پایین بسیار کندتر از الکترونها بوده و وضعیت یونها در مکان کاتوره‌ای است می‌توان فرض کرد الکترون تحت تاثیر پتانسیلی است که در فضا از یک هندسه‌ی کاتوره‌ای تبعیت می‌کند.

در اینجا دو تقریب منطقی به نظر می‌رسد.

۱ — تقریب آدیاباتیک [۱]: به معنای صرفنظر از حرکت یونها بدلیل آدیاباتیک بودن حرکت آنها نسبت به حرکات سریع الکترونی .

[۱] Addiabatic Approximation