Κείμενο Παρουσίασης Στοχαστικών Διεργασιών

Τυχαία Δυναμικά – Μοντέλο Anderson – Anderson Localisation

Βασίλειος Βαλατσός

Contents

1 Τυχαία Δυναμικά

Στην παρουσίαση αυτή, θα ασχοληθούμε με τυχαία δυναμικά, τα οποία χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση άτακτων στερεών. Στους κρυστάλλους, τα άτομα ή οι πυρήνες, είναι κατανεμημένοι περιοδικά με απόλυτα φυσιολογικό τρόπο. Αν πούμε ότι έχουμε έν ηλεκτρόνιο πάνω σε αυτόν τον κρύσταλλο, νιώθει δυναμικό κατά τα γνωστά, άρα συνολικά νιώθει το άθροισμα των δυναμικών από κάθε άτομο.

Τα περισσότερα όμως στερεά δεν αποτελούνται από τέλειους κρυστάλλους. Οι θέσεις των ατόμων μπορεί να διαφέρουν από τις «ιδανικές» θέσεις τους, εξαιτίας ατελειών κατά την κρυσταλλοποίηση. Ή μπορεί να έχω άμορφα υλικά που δεν έχουν την παραμικρή δομή. Αλλιώς μπορεί το στερεό να αποτελείται από κράμα υλικών. Οπότε η ανάγκη για αλλαγή του δομημένου δυναμικού προκύπτει για την μελέτη αυτών των περιπτώσεων.

Εδώ ασχολήθηκα με την περίπτωση του κράματος, οπότε το δυναμικό παίρνει αυτή την μορφή, όπου το άτομο σε κάθε θέση είναι τυχαίο και θέτουμε ότι κάθε άτομο έχει τυχαίο φορτίο, σε κάθε θέση δηλαδή έχουμε τυχαίο φορτίο στο δυναμικό. Αναφέρω ότι η κατανομή είναι συνεχής.

Αυτό που ελπίζουμε να βγάλουμε με αυτή την μελέτη είναι να βρούμε τυπικές ιδιότητες του H_ω της μορφής «το σύνολο των ω του H_ω τέτοιου ώστε το H_ω να έχει την ιδιότητα τάδε έχει πιθανότητα 1» για συντομία «Η τάδε ιδιότητα συμβαίνει σχεδόν πάντα», όπου το σχεδόν υπάρχει επειδή το 1 είναι το όριο της πιθανότητας.

Προφανώς, στην πραγματικότητα υπάρχουν πολύ περισσότερες αλληλεπιδράσεις πέρα του ενός ηλεκτρονίου με κάθε άτομο ξεχωριστά, αλλά μελετάμε το one body problem γιατί αυτό είναι το επιλύσιμο.

2 Μοντέλο Anderson

Στο *Anderson model*, αντί για τον τετραγωνικά ολοκληρώσημο χώρο L^2, έχουμε τον τετραγωνικά αθροίσημο ℓ^2 όπου σκεφτόμαστε σωματίδια να περπατάνε πάνω σε έναν κρύσταλλο $\mathbb{Z}^d$, έτσι ώστε η πιθανότητα να βρώ το σωματίδιο στην θέση n να έχει $n \in \mathbb{Z}^d$. Βολεύει για τις πράξεις, παρόλο που δεν τις δείχνω, να ορίσουμε δύο διαφορετικές νόρμες για το $\mathbb{Z}^d$, $\|n\|_\infty$ και $\|n\|_1$.

Ο κινητικός όρος της Χαμιλτονιανής H_0 παίρνει μορφή ανάλογη της λαπλασιανής, αλλά στο διακριτό, οπότε εάν πάρουμε τον μετασχηματισμό φουριέ, ο H_0 είναι ένας πολλαπλασιαστικός τελεστής, με αυτή την συνάρτηση.Χάρη σε αυτό παίρνουμε ότι το φάσμα του τελεστή H_0 είναι $\sigma[0, 4d]$.

Πολύ βολικά ορίζεται και η δ του Dirac ως $(\delta_i)_j$ του Kronecker, με την πολύ ωραία ιδιότητα ότι η συλλογή των δ_{ii} αποτελεί ορθοκανονική βάση στον ℓ^2, έτσι ώστε να μπορέσουμε να ορίσουμε ένα kernel για κάθε τελεστή A στο ℓ^2. Κατά αυτόν τον τρόπο, το δυναμικό είναι ενας πολλαπλασιαστικός τελεστής, με συνάρτηση $V(n)$, και ο πιό απλός τρόπος να το κάνουμε τυχαίο είναι να πούμε ότι $V(n) = V_\omega(n)$σαν σύνολο ανεξαρτήτων, όμοια κατανεμημένων τυχαίων μεταβλητών. Συνεπώς έχουμε ότι $H_\omega = H_0 + V_\omega$ το *Anderson model*.

3 Εργοδικότητα

Μια οικογένεια τυχαίων μεταβλητών $\{X_i\}$ είναι μια στοχαστική διεργασία. Άρα, υπάρχει χώρος πιθανοτήτων Ω με μέτρο πιθανότητας $\mathbb{P}$ έτσι ώστε, τα X_i να είναι πραγματικές, μετρήσιμες συναρτήσεις στον Ω. Η επιλογή του Ω τέτοιου ως $X_i(\omega) = \omega_i$ ονομάζεται κανονικός χώρος πιθανοτήτων. Δεδομένου χώρου πιθανοτήτων Ω, ορίζεται T, μετασχηματισμός που διατηρεί το μέτρο, εαν $\mathbb{P}(T^{-1}A) = \mathbb{P}(A) \forall A \in \mathbb{R}$

Εάν T_i οικογένεια τέτοιων μετασχηματισμών, τότε λέμε το σύνολο A αναλλοίωτο εάν $T^{-1}A = A \forall i$. Εάν αυτά τα A έχουν όλα πιθανότητα 0 ή 1 τότε οι μετασχηματισμοί αυτοί λέγονται εργοδικοί. Αντίστοιχα, εργοδική διαδικασία ονομάζεται μια διαδικασία έαν υπάρχει εργοδική οικογένεια μετασχηματισμών, τέτοια ώστε $X_i(T_j\omega) = X_{i-j}(\omega)$.

Αφού λοιπόν, το V_ω αποτελείτε από ανεξάρτητα ομοίως κατανεμημένα V_ω, είναι εργοδικό[1] και συνεπώς μπορεί κανείς να πεί ότι υπάρχει κάποιος μετασχηματισμός $\{T_i\}$ στον χώρο πιθανοτήτων, τέτοιο ώστε το V_ω να ικανοποιεί το ότι ο μετασχηματισμός να αντιστοιχεί σε αλλαγή θέσης στον κρύσταλλο καθώς και να διασφαλίζει ότι κάθε μετρήσημο υποσύνολο του Ω, αναλλοίωτο υπό μετασχηματισμό $\{T_i\}$ έχει τετρημένη πιθανότητα (0 ή 1).

Ορίζουμε τον τελεστή μετάθεσης $\{U_i\}$ στον τετραγωνικά αθροίσιμο χώρο ℓ^2 έτσι ώστε η δράση τους να αντιστοιχεί σε αλλαγή σημείου στον κρύσταλλο. Προφανώς, αυτοί οι τελεστές είναι μοναδιακοί.

Εφόσων το H_0 μετατίθεται με τον τελεστή μετάθεσης, είναι εργοδικός, μιας και αυτός είναι ο ορισμός ενός εργοδικού τελεστή.

Αυτό είναι σημαντικό διότι έρχεται ο $Pastur$ με το θεώρημα, που λέει ότι εάν ο H_ω είναι μια εργοδική οικογένεια αυτοσυζηγών τελεστών, που είναι, τότε, ορίζεται ένα κλειστό, ΜΗ τυχαίο σύνολο των πραγματικών, ονόματι Σ, τέτοιο ώστε $\sigma(H_\omega) = \Sigma$, το οποίο είναι το φάσμα του τελεστή.

[1] αφού $\mathbb{P}$ είναι το γινόμενο μέτρο του P_0

4 Φασματική Ανάλυση

Μελετάμε λοιπόν την σχέση γενικευμένων ιδιοσυναρτήσεων διακριτών Χαμλιτονιανών με τα φάσματά τους. Η λ ονομάζεται γενικευμένη ιδιοτιμή όταν υπάρχει μια πολυωνυμικά φραγμένη λύση της εξίσωσης

$$H\psi = E\psi$$

Η ψ ονομάζεται γενικευμένη ιδιοκατάσταση. Το σύνολο των γενικευμένων ιδιοκαταστάσεων, το βαφτίζω $\epsilon_g(H)$. Αποδεικνύεται, ότι το φάσμα της Χαμιλτονιανής συμφωνεί με το σύνολο των γενικευμένων ιδιοσυναρτήσεων ως έναν βαθμό, δηλαδή κάθε γενικευμένη ιδιοτιμή ανήκει στο φάσμα της Χαμιλτονιανής.

Το φάσμα μπορεί να χωρηστεί εύκολα, με χρήση θεωρίας μέτρου, σε τρία «υποφάσματα»

· *pure point*

· *absolutely continuous*

· *singular continuous*

τα οποία δεν είναι ακριβώς υποφάσματα, γιατί δεν είναι τελείως ξεχωριστά μεταξύ τους.

Μπορεί να πει κάποιος «ναι αλλά στην φυσική μας ενδιαφέρει η συμπεριφορά του συστήματος σε βάθος χρόνου», όπως όταν χωρίζει κανείς τις καταστάσεις σε δέσμιες ή σκεδασμένες. Όμως, υπάρχει πολύ μεγάλη σύνδεση το σπάσιμο του φάσματος που μελετήσαμε με την χρονική εξέλιξη του συστήματος.

Αν πούμε E μια ιδιοτιμή της Χαμιλτονιανής, και φ την αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση, τότε το φασματικό μέτρο μ έχει ένα άτομο στο E[2] και μ_φ είναι το *pure point* μέτρο συγκεντρωμένο γύρω από το E[3] Συνεπώς, όλες οι ιδιοσυναρτήσεις και το κλειστό υποσύνολο που ορίζουν, ανήκουν στον *pure point* υποχώρο $\mathcal{H}_{pp}$, με άλλα λόγια, το $\mathcal{H}_{pp}$ είναι το κλείσιμο του γραμμικού εύρους των ιδιοσυναρτήσεων.

Συνεπάγεται απλά, ότι το σύνολο $\epsilon(H)$ είναι πυκνό υποσύνολο του *pure point* φάσματος της Χαμιλτονιανής. Το σύνολο αυτό, μπορεί να είναι αριθμήσιμο, μπορεί να έχει σημεία συσσώρευσης, και γενικά μπορεί να είναι και πυκνό σε ολόκληρο το διάστημα.

Μελετώντας την χρονοεξέλιξη μιας συνάρτησης εντός του υποχώρου $\mathcal{H}_{pp}$, βλέπουμε ότι η πιθανότητα του είναι ανεξάρτητη οποιασδήποτε χρονικής παραμέτρου και συνεπώς αυτή η συνάρτηση αντισοιχεί σε μια δέσμια κατάσταση.

Μελετώντας την χρονοεξέλιξη μιας συνάρτησης εντός του υποχώρου $\mathcal{H}_{ac}$, πρέπει πρώτα να πούμε τα εξής. Όπως πρίν είχαμε το μ_ϕ, τώρα έχουμε το $\mu\psi$ το οποίο πρέπει να είναι συνεχές,[4] και καταλήγουμε στό ότι αυτές οι καταστάσεις είναι οι σκεδαζόμενες καταστάσεις.

[2] Αν έχω το σύνολο {1,2,3,4}, κάθε στοιχείο είναι άτομο αν το μέτρο είναι ο αριθμός των στοιχείων

[3] Ruelle, Amrein,Gorgescu,Enss, RAGE theorem

[4] το $\mu_{\phi,\psi}$ πρέπει να είναι επίσης απόλυτα συνεχές και συνεπώς το μέτρο πρέπει να έχει μια πυκνότητα h σχετιζόμενη με το μέτρο Lebesgue, το Fourier της οποίας, από το Riemann-Lebesgue Lemma πάει στο 0 για $t \to \infty$

Από τα παραπάνω, τα *pure point* μεταφράζονται σαν δέσμιες καταστάσεις με χαμηλή κινητικότητα, ενώ τα *absolutely continuous* έχουν μεγάλη κινητικότητα και συνεπώς είναι οι φορείς μεταφορικών φαινομένων όπως η αγωγημότητα.[5]

[5] τα singularly continuous φάσματα συναντόνται σε quasicrystals και γενικά σε απεριοδικά συστήματα μεγάλης τάξης

5 Άτομο του Υδρογόνου

Ένα σχετικά απλό παράδειγμα, είναι το άτομο του Υδρογόνου. Εάν εξαιρέσουμε την κίνηση του κέντρου μάζας, έχουμε ένα σωματίδιο το οποίο κινείται υπό την επηρόια δυναμικού Coulomb $V(x) = -\frac{Z}{|x|}$.

Το φάσμα του τελεστή που αντιστοιχεί στο πρόβλημα, έχει άπειρες ιδιοτιμές, συσσωρευμένες στο 0 και στο διάστημα $[0, \infty)$, που αναπαρηστούν το $a.c.$ φάσμα και αντιστοιχούν σε ένα ηλεκτρόνιο, να έρχεται από το άπειρο, να σκεδάζεται στον πυρήνα και να φέυγει στο άπειρο, ενώ οι αρνητικές ιδιοτιμές της αντιστοιχούν σε δέσμιες καταστάσεις, δηλαδή τις τροχιές.

6 Anderson localization

Ξέρουμε ότι το φάσμα της Χαμιλτονιανής δίνετε από το

$$supp(P_0) + [0, 4d]^6$$

με P_0 η κατανομή του δυναμικού. Συνεπώς, εάν το $supp(P_0)^7$ αποτελείται από περπερασμένο αριθμό σημείων ή διαστημάτων, το φάσμα Σ έχει ένα εύρος ενεργειών υπό την έννοια ότι είναι ένα σύστημα κλειστών διαστημάτων.[8]

Στην μονοδιάστατη περίπτωση, περιμένει κανείς ότι το φάσμα θα είναι Pure point. Αυτό σημαίνει ότι έχω ένα πλήρες σύστημα ιδιοσυναρτήσεων καθώς και ότι οι (αριθμίσημα πολλές) ιδιοτιμές σχηματίζουν ένα πυκνό σύνολο[9] Σ. Συνεπώς οι ιδιοσυναρτήσεις μηδενίζουν στο άπειρο και το φαινόμενο αυτό ονομάζεται *Anderson Localization*. Με βάση αυτά που είπα πιο πριν, ο περιορισμός αυτός αντιστοιχεί σε χαμηλή κινητικότητα των ηλεκτρονίων στο σύστημά μας. Συνεπώς, περιμένουμε ότι τα ακατάστατα μονοδιάστατα συστήματα θα έχουν χαμηλή ή εκλειπούσα αγωγιμότητα.

Για d διαστάσεις, ένα ordered κβαντομηχανικό σύστημα έχει απόλυτα συνεχές φάσμα. Αυτό είναι γνωστό για γενικευμένα d-διάστατα περιοδικά δυναμικά. Συνεπώς, στην μία διάσταση, μια οσοδήποτε μικρή αταξία θα αλλάξει το φάσμα από συνεχές σε *pure point* και συνεπώς έναν αγωγό σε μονωτή.

Για $d \geq 3$ διαστάσεις η φυσική αλλάζει (και γίνεται και πιο περίπλοκη). Εφόσον η αταξία δεν είναι αρκετά ισχυρή, ο περιορισμός αυτός συμβαίνει μόνο κοντά στα band edge του φάσματος. Άρα γύρω από το band edge, υπάρχει μια περιοχή με *pure point* φάσμα και οι ιδιοσυναρτήσεις είναι εκθετικά περιορισμένες, δηλαδή μηδενίζονται εκθετικά γρήγορα στο άπειρο.

Εντώς των bands, περιμένουμε ότι το φάσμα είναι απόλυτα συνεχές για αρκετά μικρή αταξία σε $d \geq 3$ και εφόσων οι γενικευμένες ιδιοσυναρτήσεις σίγουρα *δεν* είναι τετραγωνικά ολοκληρώσημες, μιλάει κανείς για *Anderson Delocalization*. Αν αυξηθεί η αταξία, το *pure point* φάσμα θα απλωθεί και το απόλυτα συνεχές θα συρρηκνωθεί αντίστοιχα. Το σημείο στο οποίο συμβαίνει η αλλαγή της αγώγιμης κατάστασης στην μονωτική καταστaση ονομάζεται *mobility edge*.

Αξίζει να ανεφέρω ότι ο λόγος για τον οποίο δεν αναφέρθηκα στην δισδιάστατη περίπτωση, είναι επειδή δεν υπάρχει ακριβής απάντηση. Το general consensus, είναι ότι έχω ολικό *localisation* για $d = 2$ αλλά λιγότερο ευσταθή. π.χ. ενα μαγνητικό πεδίο ίσως να μπορεί να χαλάσει το φαινόμενο.

[6]Το $\sigma(H_0)$ βρίσκεται από το fourier της διακρητής λαπλασιανής
[7]το φάσμα του μέτρου πιθανότητας
[8]Άν το supp είναι συμπαγές, ο τελεστής είναι δέσμιος
[9]ότι δηλαδή θα καύπτουν πλήρως το σύνολο των δυνατών ιδιοτιμών, είτε οριακά θα κάνουν αυτό