

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΜΕΛΕΤΗ ΕΝΤΟΠΙΣΜΟΥ ΣΕ ΑΝΙΣΟΤΡΟΠΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ

ΕΙΡΗΝΗ ΖΑΜΠΕΤΑΚΗ-ΑΠΟΣΤΟΛΑΚΗ

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΤΜΗΜΑ ΦΥΣΙΚΗΣ

ΙΟΥΛΙΟΣ 1997

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή μου Ελευθέριο Οικονόμου για την πάντα πρόθυμη καθοδήγησή του με πολύτιμες συμβουλές και παρατηρήσεις κατά την εκπόνηση της διδακτορικής διατριβής μου.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ επίσης οφείλω στους καθηγητές Κ.Μ.Σούκουλη και Σ.Ν. Ευαγγέλου για τις εύστοχες παρατηρήσεις και υποδείξεις τους στη διάρκεια της εκπόνησης της διατριβής μου καθώς και στη διόρθωση του παρόντος κειμένου.

Τέλος, ευχαριστώ το τμήμα Φυσικής του Πανεπιστημίου Κρήτης και το Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λείζερ του Ιδρύματος Τεχνολογίας και Έρευνας για την τεχνική και οικονομική υποστήριξη κατά τα χρόνια των σπουδών μου.

Στον σύζυγό μου Μιχάλη

0.Εισαγωγή	6
1. Κεφάλαιο 1	10
1.1 Προσέγγιση της Ισχυρής Δέσμευσης	10
1.2 Η Χαμιλτονιανή του συστήματος	12
2. Κεφάλαιο 2	15
2.1 Ατελείς κρύσταλλοι	15
2.2 Εισαγωγή της ιδέας του εντοπισμού	16
3. Κεφάλαιο 3 Σύντομη επισκόπηση της ιστορίας του εντοπισμού	20
3.1 Η εποχή πριν τη θεωρία κλίμακας	20
3.2 Η θεωρία κλίμακας	21
3.3 Η συμπεριφορά στο κρίσιμο σημείο	24
3.4 Αριθμητική εργασία και θεωρία κλίμακας	25
4. Κεφάλαιο 4 Εντοπισμός	28
4.1 Στοιχεία της θεωρίας εντοπισμού	28
4.2 Γνωστά αποτελέσματα για το πρόβλημα του εντοπισμού σε ισότροπα άτακτα συστήματα	34

5. Κεφάλαιο 5	Μέθοδοι που χρησιμοποιούμε	36
5.1	Αριθμητική Μέθοδος	36
5.1.1	Μέθοδος των Πινάκων Μεταφοράς	36
5.1.2	Η υπόθεση κλίμακας	40
5.2	Μέθοδος CPA + PWA	42
5.2.1	Σύνδεση του εντοπισμού με το πρόβλημα μιας δέσμιας κατάστασης σε πηγάδι δυναμικού	43
5.2.2	Coherent Potential Approximation (CPA)	44
6. Κεφάλαιο 6	Εντοπισμός σε ανισότροπα συστήματα	48
6.1 ΜΕΡΟΣ I:	Μελέτη ασθενώς συζευγμένων επιπέδων και αλυσίδων	50
6.1.1	Αριθμητική εργασία	52
6.1.1.1	Συζήτηση για τον λόγο $\frac{g^\perp}{g^\parallel}$	53
6.1.1.2	Συζήτηση για τον υπολογισμό και το σφάλμα του γ_{min}	56
6.1.1.3	Υπολογισμός της g μέσω Lyapunov εκθετών	58
6.1.1.4	Εξήγηση των σχέσεων $\xi^\parallel = t^2 \xi^\perp$ και $L_c^\perp = tL_c^\parallel$	62
6.1.1.5	Τρόπος υπολογισμού του εκθέτη ν	65
6.1.1.6	Υπολογισμός του ν^\perp	67

6.1.1.7 Υπολογισμός του v''	71
6.1.1.8 Υπολογισμός του v'' (με $L=100000$ και $M=11,13,15$)	74
6.1.1.9 Υπολογισμός του v'' (με $L=100000$ και $M=9, 11, 13$)	76
6.1.1.10 Υπολογισμός της β -συνάρτησης	78
6.1.2 Αναλυτική εργασία	98
6.1.2.1 Υπολογισμός των $ImG^{(3)}$ για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων	101
6.1.2.2 Όρια των $ImG^{(3)}$ όταν $t \rightarrow 0$ για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων	103
6.1.2.3 Όρια των t_e και τ_c όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων	104
6.1.2.4 CPA για σύζευξη αλυσίδων	105
6.1.2.5 Υπολογισμός των $ImG^{(3)}$ για σύστημα συζευγμένων επιπέδων	106
6.1.2.6 Όρια των $ImG^{(3)}$ όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων επιπέδων	107
6.1.2.7 Όρια των t_e και τ_c όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων επιπέδων	108
6.1.2.8 CPA για σύζευξη επιπέδων	109
6.1.2.9 Υπολογισμός της Πυκνότητας Καταστάσεων	111

6.1.2.10 Μέση ελεύθερη διαδρομή, παράλληλα και κάθετα στα επίπεδα	112
6.1.3 Σύνοψη συμπερασμάτων του ΜΕΡΟΥΣ I	113
6.2 ΜΕΡΟΣ II: Μελέτη συστήματος τυχαία αλυσίδων	115
6.2.1 Ανισοτροπία λόγω του $c \neq 1$	116
6.2.1.1 Υπολογισμός του εκθέτη ν	89
6.2.2 Ανισοτροπία λόγω $J \neq 1$ και $c \neq 1$	91
6.2.2.1 Εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού του W_c και του ν	92
6.2.2.2 Υπολογισμός του ν	96
6.2.3 Εφαρμογή σε αγώγιμα πολυμερή και σύγκριση με MFT	98
6.2.3.1 Υπολογισμός των k και μ στη σχέση $W_c \approx 16V^{1-k} J^k c^\mu$	100
6.2.4 Σύνοψη συμπερασμάτων του ΜΕΡΟΥΣ II	102

Αναφορές	
Παράρτημα A1	
Παράρτημα A2	
Παράρτημα A3	
Παράρτημα A4	

Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια, το πρόβλημα του εντοπισμού Anderson σε ανισότροπα συστήματα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον στην έρευνα [Abrikosov (1994), Rojo and Levin (1993), Qiming Li *et al* (1989), Xue *et al* (1989, 1990), Chu and Zhang (1993)]. Ένα ενδιαφέρον ανισότροπο σύστημα είναι οι high- T_c υπεραγωγοί, στους οποίους η διάδοση στην κανονική κατάσταση είναι μεταλλική στο xy -επίπεδο, αλλά φαίνεται σαν ημιαγώγιμη στον z -άξονα [Iye (1992)]. Η φύση της διάδοσης στον z -άξονα τέτοιων υλικών είναι ακόμη αμφισβητήσιμη, και η κατανόησή της μπορεί να έχει σημαντικές συνέπειες στις θεωρίες για την κανονική και την υπεραγώγιμη κατάσταση. Αυτή η παράδοξη ιδιότητα έχει οδηγήσει στην πρόταση [Kotliar *et al* (1991)] ότι ένα high- T_c υλικό στην κανονική κατάσταση είναι στην πραγματικότητα μονωτής, και εμφανίζεται σαν μέταλλο μόνο επειδή μέσα στο επίπεδο το μήκος ανελαστικής σκέδασης είναι μικρότερο από το μήκος εντοπισμού. Επίσης, έχει συζητηθεί [Rojo and Levin (1993), Iye (1992)] ότι ένα αρνητικό $\frac{d\rho}{dT}$ μόνο στη z -διεύθυνση, ίσως δηλώνει ανισότροπο εντοπισμό με μια μετάβαση μετάλλου-μονωτή (metal-insulator transition (MIT)) που εξαρτάται από τη διεύθυνση διάδοσης, σε αντίθεση με τις προβλέψεις της θεωρίας κλίμακας του εντοπισμού [Kramer and Mackinnon (1993)]. Ένας πρόσφατος διαγραμματικός υπολογισμός [Abrikosov (1994)] υποστήριξε αυτή την άποψη. Όμως προηγούμενη διαγραμματική ανάλυση [Wölfle and Bhatt (1984), Bhatt *et al* (1985), Vollhardt and Wölfle (1992)], οδήγησε στο συμπέρασμα ότι οι ιδιότητες κλίμακας σε ανισότροπα συστήματα παραμένουν οι ίδιες όπως στα ισότροπα συστήματα με μια απλή αντικατάσταση της αγωγιμότητας με τον γεωμετρικό μέσο όρο της. Επειδή τα προηγούμενα αποτελέσματα βασίζονται στη θεωρία διαταραχών όλων των προηγούμενων εργασιών, είναι σημαντικό να μελετήσουμε προσεκτικά τη συμπεριφορά του εντοπισμού άτακτων ανισότροπων συστημάτων με αξιόπιστες αριθμητικές τεχνικές, και να δούμε αν η θεωρία κλίμακας ισχύει για ισχυρά ανισότροπα

συστήματα [Kramer and Mackinnon (1993), Wölfle and Bhatt (1984), Bhatt *et al* (1985), Vollhardt and Wölfle (1992), Apel and Rice (1983)]. Για το σκοπό αυτό, έγινε το ΜΕΡΟΣ Ι της εργασίας αυτής (στο κεφάλαιο 6.1), όπου μελετάμε συστηματικά τις ιδιότητες εντοπισμού σε ανισότροπα συστήματα, όπως ασθενώς συζευγμένα επίπεδα. Η μελέτη του εντοπισμού κάθετα και παράλληλα στα ασθενώς συζευγμένα επίπεδα και η διαφορά που βρίσκουμε ανάμεσα στα μήκη συσχέτισης στις διαφορετικές διευθύνσεις διάδοσης, μπορεί ίσως να μας δώσει μια εξήγηση για τις ιδιότητες διάδοσης στην κανονική κατάσταση των high- T_c υπεραγωγών.

Ένα άλλο ενδιαφέρον ανισότροπο σύστημα είναι τα αγωγιμα συζευγμένα πολυμερή, τα οποία φαίνεται να υπακούουν μια μετάβαση μετάλλου-μονωτή λόγω αταξίας. Σχετικά με τα υλικά αυτά υπάρχουν πειραματικά αποτελέσματα [Ishiguro *et al* (1992), Javadi *et al* (1991), Nogami *et al* (1991)], μια θεωρητική μελέτη [Prigodin and Efeton (1993)] που αναπτύχθηκε με θεωρία πεδίου, και άλλες πρόσφατες θεωρητικές μελέτες [Xiong and Evangelou (1995), Markos and Evangelou (1996), Xiong *et al* (1996)] που έγιναν λαμβάνοντας υπόψη την τοπολογικά ελικώδη δομή των πολυμερών. Στα αγωγιμα συζευγμένα πολυμερή, που αποτελούνται από πολλές αλυσίδες, οι αλυσίδες με αταξία συζεύγνυνται σε ίνες, οι οποίες με τη σειρά τους δημιουργούν ένα δίκτυο με τυχαίες συνδέσεις μεταξύ ινών. Το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό τους, όσον αφορά τις ηλεκτρονικές τους ιδιότητες, είναι η υψηλή αγωγιμότητα που μπορεί να επιτευχθεί με doping [Ishiguro *et al* (1992), Javadi *et al* (1991), Nogami *et al* (1991)]. Από την άλλη μεριά, οι πειραματικές παρατηρήσεις σε υψηλά doped ίνες πολυμερών $(CH)_x$ [Javadi *et al* (1991)] δείχνουν μια αρνητική μαγνητοαντίσταση, η οποία συμφωνεί με το γεγονός ότι για μία ίνα μόνη της η παρουσία αταξίας θα έχει ως αποτέλεσμα τον εντοπισμό των ηλεκτρονιακών της καταστάσεων. Εκτεταμένες καταστάσεις και αγωγιμες ιδιότητες, οι οποίες φαίνονται πειραματικά σαν αλλαγή προσήμου στη μαγνητοαντίσταση, μπορούν να εμφανιστούν μόνο

όταν η μεταφορά ηλεκτρονίων επιτρέπεται μεταξύ των ινών. Έτσι, περιμένουμε να πετύχουμε μια Anderson μετάβαση μετάλλου-μονωτή αλλάζοντας το μέγεθος της αταξίας και/ή τη συγκέντρωση των τυχαίων δεσμών και/ή την πιθανότητα μετάβασης μεταξύ τυχαίων ινών. Πρόσφατα πειράματα [Ishiguro *et al* (1992), Javadi *et al* (1991), Nogami *et al* (1991)] δείχνουν ότι τα υψηλά αγώγιμα συζευγμένα πολυμερή είναι πολύ κοντά σε μια μετάβαση μετάλλου-μονωτή. Μια μελέτη με θεωρία πεδίου [Prigodin and Efetov (1993)] η οποία παίρνει υπόψη τα βασικά χαρακτηριστικά της δομής αυτών των πολυμερών, έδωσε μετάβαση μετάλλου-μονωτή δείχνοντας και μια οιονεί-οικουμενικότητα στην κρίσιμη αυτή συμπεριφορά. Στο ΜΕΡΟΣ II της εργασίας αυτής (στο κεφάλαιο 6.2) μελετάμε ένα ανισότροπο μοντέλο όμοιο με αυτό των Prigodin και Efetov, λαμβάνοντας υπόψη τη μεταξύ των ινών τυχαία σύζευξη και χρησιμοποιώντας γνωστές αξιόπιστες αριθμητικές τεχνικές, με σκοπό να μελετήσουμε τη μετάβαση μετάλλου-μονωτή σε τέτοια συστήματα και να ελέγξουμε την οιονεί-οικουμενικότητα που προέκυψε από τη θεωρία πεδίου.

Στο κεφάλαιο 1 περιγράφουμε την προσέγγιση της ισχυρής δέσμευσης, την οποία χρησιμοποιούμε στους υπολογισμούς μας, στα κεφάλαια 2 και 3 κάνουμε μια ιστορική αναδρομή για το πώς ξεκίνησε η ιδέα του εντοπισμού [Soukoulis and Economou (1993)] και δίνουμε μια σύντομη επισκόπηση [Kramer and MacKinnon (1993)] της ιστορίας του. Στο κεφάλαιο 4 δίνουμε περιληπτικά γνωστά στοιχεία για τον εντοπισμό σε ισότροπα άτακτα συστήματα [Soukoulis and Economou (1993)]. Στο κεφάλαιο 5 περιγράφουμε τις μεθόδους που χρησιμοποιούμε για τους δικούς μας υπολογισμούς, και τέλος στο κεφάλαιο 6 δίνουμε όλη τη δική μας μελέτη του εντοπισμού σε ανισότροπα συστήματα.

Κεφάλαιο 1

Προσέγγιση της Ισχυρής Δέσμμευσης

Αν θεωρήσουμε μερικά απομονωμένα άτομα σαν ένα σύστημα, το σύνολο των ηλεκτρονικών καταστάσεων του συστήματος θα ήταν απλά μια συλλογή όλων των καταστάσεων από όλα τα άτομα. Αν τα άτομα έρθουν αρκετά κοντά ώστε οι κυματοσυναρτήσεις του ενός ατόμου να αλληλοεπικαλύπτονται από τις κυματοσυναρτήσεις των άλλων, οι ενέργειες των καταστάσεων θα αλλάξουν, αλλά ο αριθμός των καταστάσεων θα παραμείνει ο ίδιος.

Ας πάρουμε για παράδειγμα δύο ίδια άτομα A και B , και έστω ότι έχουμε ένα τροχιακό στο καθένα Φ_A και Φ_B όπου είναι λύσεις της ατομικής Χαμιλτονιανής. Δηλαδή

$$H^A \Phi_A = E \Phi_A \quad \text{και} \quad H^B \Phi_B = E \Phi_B. \quad (1.1)$$

ηλεκτρόνιο η καθεμία. Το κάθε άτομο έχει φυσικά και άλλες καταστάσεις ψηλότερες ενεργειακά, αλλά ίσως και χαμηλότερες ενεργειακά. Όταν τα δύο αυτά άτομα έρθουν κοντά, η ολική Χαμιλτονιανή H θα έχει διαγώνια στοιχεία πίνακα που είναι κοντά στην ενέργεια E και μη διαγώνια στοιχεία V που έχουν ισχυρή εξάρτηση από την απόσταση. Εύκολα μπορεί να δείξει κανείς ότι οι ιδιοενέργειες του συστήματος είναι $E \pm V$. Άρα οι δύο καταστάσεις με ενέργεια E που είχαμε όταν τα άτομα ήταν στο άπειρο, έδωσαν δύο άλλες καταστάσεις μετατοπισμένες κατά $\pm V$. Τα δύο ηλεκτρόνια

που διαθέτουμε, θα εποικίσουν τη χαμηλότερη ενεργειακά (δεσμική κατάσταση) δίνοντας μια συνολική μείωση της ενέργειας $2|V|$ σε σχέση με τη συνολική ενέργεια των δύο απομονωμένων ατόμων.

Τις χαμηλότερες ενεργειακά καταστάσεις (με ενέργεια στο άπειρο $< E$) των δύο ατόμων τις αγνοήσαμε γιατί με τον ίδιο τρόπο θα δώσουν δύο καταστάσεις που όμως θα είναι και οι δύο πλήρως κατειλημμένες όπως και οι αρχικές και άρα το ενεργειακό κέρδος από αυτές θα είναι μηδέν. Αυτό βέβαια ισχύει στην περίπτωση όπου το V είναι πολύ μικρότερο από την ενεργειακή απόσταση αυτών των καταστάσεων από το E . Αν το V είναι αρκετά μεγάλο ώστε οι καταστάσεις $E \pm V$ που προκύπτουν να ανακατεύονται με τις $E' \pm V$ (όπου $E' < E$), τότε σαφώς δεν μπορούμε να αγνοήσουμε τις ενεργειακά χαμηλότερες καταστάσεις E' . Στην προσέγγιση της ισχυρής δέσμευσης παίρνουμε υπόψη τις λιγότερες δυνατές καταστάσεις που μπορούμε ώστε να περιγραφεί σωστά το πρόβλημα. Δηλαδή μία κατάσταση ανά άτομο, αν το V είναι μικρό, ή λίγο περισσότερες, αν το V είναι μεγαλύτερο.

Στην προσέγγιση της Ισχυρής Δέσμευσης (Tight Binding) η Χαμιλτονιανή του συστήματος του κρυστάλλου ή του μορίου, γράφεται στη βάση στοιχείων εντοπισμένων στις ατομικές θέσεις. Τα στοιχεία αυτά είναι συνήθως συναρτήσεις που μοιάζουν με τα ατομικά τροχιακά. Η ολική κυματοσυνάρτηση του συστήματος προκύπτει από το γραμμικό συνδυασμό αυτών των στοιχείων της βάσης που χρησιμοποιούμε, και για το λόγο αυτό η μέθοδος ονομάζεται και μέθοδος του γραμμικού συνδυασμού των ατομικών τροχιακών (Linear Combination of Atomic Orbitals).

Παίρνοντας τα στοιχεία της βάσης να είναι τύπου ατομικών τροχιακών (και μάλιστα ένας πεπερασμένος αριθμός από αυτά), είναι σαν να θεωρούμε ότι στην περιοχή του κάθε ατόμου η ολική Χαμιλτονιανή είναι πολύ κοντά στην ατομική Χαμιλτονιανή, και άρα τα ηλεκτρόνια σαν να είναι ισχυρά συνδεδεμένα με τους πυρήνες.

Για το λόγο αυτό η μέθοδος ονομάζεται και προσέγγιση της Ισχυρής Δέσμωσης. Τα στοιχεία πίνακα ανάμεσα στα τροχιακά επιτρέπουν στα ηλεκτρόνια να κινούνται από άτομο σε άτομο.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος

Έστω ότι θέλουμε να μελετήσουμε ένα πλέγμα που αποτελείται από N άτομα, χρησιμοποιώντας την προσέγγιση Ισχυρής Δέσμωσης, και έστω ότι παίρνουμε ν στοιχεία βάσης (τροχιακά) ανά άτομο. Τα στοιχεία της βάσης τα συμβολίζουμε με $|n, \alpha\rangle$ (δηλαδή είναι τύπου α ($\alpha=1, \nu$), εντοπισμένο στο άτομο n ($n=1, N$)).

Η άγνωστη κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathcal{R}) \equiv \langle \mathcal{R} | \psi \rangle$ που θέλουμε να προσδιορίσουμε, γράφεται σαν γραμμικός συνδυασμός των $\Phi_{na}(\mathcal{R}) = \langle \mathcal{R} | n, a \rangle$, δηλαδή:

$$|\psi\rangle = \sum_{n,a} C_{n,a} |n, a\rangle. \quad (1.2)$$

Στην παρούσα εργασία θεωρούμε ένα τροχιακό ανά άτομο, δηλαδή $\nu=1$ και $|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$.

Χρησιμοποιούμε το συμβολισμό Dirac με τα *bra* $\langle |$ και τα *ket* $| \rangle$ να είναι διανύσματα ενός διανυσματικού χώρου Hilbert, και όταν ένα *ket* $|\psi\rangle$ προβληθεί πάνω στο *bra* $\langle \mathcal{F}|$ του πραγματικού χώρου, μας δίνει την κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathcal{F}) = \langle \mathcal{F} | \psi \rangle$. Στον ίδιο συμβολισμό, είναι $\Phi_{na}(\mathcal{F}) = \langle \mathcal{F} | n, a \rangle$ ή $\Phi_n(\mathcal{F}) = \langle \mathcal{F} | n \rangle$ όταν παίρνω ένα τροχιακό ανά άτομο. Στην εξίσωση ιδιοτιμών $H\Psi = E\Psi$ αν πάρουμε από αριστερά το *bra* $\langle m$ έχουμε:

$$\sum_n C_n \langle m | H | n \rangle = E \sum_n \langle m | n \rangle,$$

(1.3)

όπου:

$$\langle m | H | n \rangle = \int \Phi_m^*(\mathcal{F}) H \Phi_n(\mathcal{F}) d^3\mathcal{F}$$

$$\langle m | n \rangle = \int \Phi_m^*(\mathcal{F}) \Phi_n(\mathcal{F}) d^3\mathcal{F}$$

Η Χαμιλτονιανή ισχυρής δέσμευσης για τρισδιάστατο σύστημα έχει τη μορφή:

$$H = \sum_{m,n,l} \varepsilon_{m,n,l} |mnl\rangle \langle mnl| + \sum_{\substack{m,n,l \\ m',n',l'}} V_{m,n,l}^{m',n',l'} |m,n,l\rangle \langle m',n',l'| \quad (1.4)$$

όπου $\varepsilon_{m,n,l}$ είναι η ενέργεια στη θέση (m,n,l) με $\left. \begin{array}{l} m=1,\dots,M \\ n=1,\dots,M \\ l=1,\dots,L \end{array} \right\}$ για ένα σύστημα $M \times M \times L$

έχουν μια αισθητή επικάλυψη, θεωρούμε μη μηδενικά μόνο τα στοιχεία πίνακα μεταξύ πρώτων γειτόνων, δηλαδή μόνο τα $V_{m,n,l}^{m\pm 1, n, l}$, $V_{m,n,l}^{m, n, l\pm 1}$ είναι διαφορετικά του μηδενός.

Αν τα $\varepsilon_{m,n,l}$ έχουν σε όλες τις θέσεις μια σταθερή τιμή ε , και τα $V_{m,n,l}^{m',n',l'}$ είναι ίδια, τότε το σύστημα είναι περιοδικό. Τα συστήματα

που μελετάμε είναι άτακτα, δηλαδή τα $\varepsilon_{m,n,l}$ είναι διαφορετικά μεταξύ τους και παίρνουν τυχαίες τιμές στο διάστημα $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$ με μια ορθογώνια κατανομή. Το εύρος W του διαστήματος αυτού, είναι ένα μέτρο της αταξίας του συστήματος, αφού για $W=0$ όλες οι τιμές των $\varepsilon_{m,n,l}$ θα ήταν ίδιες, ενώ όσο μεγαλύτερο είναι το W τόσο πιο διαφορετικά μπορούν να είναι τα $\varepsilon_{m,n,l}$ και άρα τόσο πιο άτακτο είναι το σύστημα.

Κεφάλαιο 2

Ατελείς κρύσταλλοι

Ας μελετήσουμε τι γίνεται αν έχουμε μια πεπερασμένη συγκέντρωση τυχαία κατανεμημένων προσμίξεων με το ίδιο δυναμικό, όπως π.χ. όταν ένας κρυσταλλικός ημιαγωγός 'ντοπάρεται' με p-τύπου προσμίξεις, οι οποίες αντικαθιστούν άτομα του πλέγματος. Εδώ η αταξία οφείλεται στη χωρική κατανομή των σκεδαστών, και χαρακτηρίζεται από τη συγκέντρωση των προσμίξεων και από τις διαφορές των οιονεί-ατομικών ενεργειακών επιπέδων μεταξύ της πρόσμιξης και των ατόμων του πλέγματος. Η αταξία επηρεάζει την πυκνότητα καταστάσεων (Density of States(DOS)) όπως και τη μορφή των κυματοσυναρτήσεων. Εν γένει, η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί σαν:

$$\psi(r)=A(r)e^{i\varphi(r)} \quad (2.1)$$

όπου για ένα περιοδικό σύστημα το πλάτος $A(r)$ είναι μια περιοδική συνάρτηση του r και η φάση $\varphi(r)$ παρουσιάζει τέλεια συμφωνία φάσεως και δίνεται από $\varphi(r)=kr$.

Σε ένα άτακτο υλικό, η φάση και το πλάτος της κυματοσυνάρτησης επηρεάζονται. Όταν η αταξία είναι μικρή, συνήθως υποθέτουμε ότι το πλάτος και η φάση της κυματοσυνάρτησης, μένουν ουσιαστικά ανεπηρέαστες, ενώ παρουσιάζεται ασυμφωνία φάσης:

$$\langle e^{i(\varphi(r)-\varphi(0))} \rangle \sim \exp(-|r| / l)$$

(2.2)

Το παραπάνω σημαίνει ότι έχει χαθεί η μνήμη για την τιμή της φάσης σε ένα δεδομένο σημείο r καθώς το κύμα έχει διαδοθεί σε μία απόσταση μεγαλύτερη ή ίση με ένα χαρακτηριστικό μήκος, το μήκος σύμφωνης φάσης, το οποίο είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με τη μέση ελεύθερη διαδρομή l . Η σκέδαση του σωματίου από τις προσμίξεις προϋποθέτει την ύπαρξη πεπερασμένου χρόνου σύγκρουσης τ . Εν γένει το l εξαρτάται από την ιδιοενέργεια E και τους άλλους κβαντικούς αριθμούς που χαρακτηρίζουν την ιδιοσυνάρτηση $\psi(r)$. Ομοίως το τ εξαρτάται από το E και το k . Για μικρή αταξία, $l(E)=v(E)\tau(E)$ όπου $v(E)$ είναι μια κατάλληλη αδιατάρακτη μέση ταχύτητα. Αν η αταξία είναι μεγάλη, επηρεάζει όχι μόνο τη φάση, αλλά και το πλάτος της κυματοσυνάρτησης. Οι κυματοσυναρτήσεις παρουσιάζουν ισχυρές διακυμάνσεις στο πλάτος. Είναι δυνατόν, για ακόμα μεγαλύτερη αταξία το $A(r) \rightarrow 0$ καθώς $|r| \rightarrow \infty$ (συνήθως με εκθετικό τρόπο).

Εισαγωγή της ιδέας του εντοπισμού

Σε ένα τέλειο κρύσταλλο, όλα τα άτομα είναι όμοια και τοποθετούνται περιοδικά στο χώρο. Αυτή η περιοδική κατανομή στο χώρο δημιουργεί τέλεια, μεγάλης εμβέλειας, μεταφορική τάξη. Μια άμεση συνέπεια αυτής της τέλειας περιοδικότητας, είναι ότι παρουσιάζονται παγκόσμια χαρακτηριστικά στην ηλεκτρονική δομή των κρυστάλλων. Τα πιο σημαντικά από αυτά είναι ότι οι ενεργειακές ζώνες διαχωρίζονται από χάσματα, η κρυσταλλική ορμή είναι καλός κβαντικός αριθμός και οι καταστάσεις είναι επίπεδα κύματα πολ/σμένα με μια συνάρτηση πλάτους που σέβεται την περιοδικότητα του πλέγματος. Αυτά τα παγκόσμια χαρακτηριστικά αποτελούν τη βάση της θεωρίας Bloch των ηλεκτρονικών καταστάσεων σε ένα τέλειο περιοδικό πλέγμα. Παρόλο που αυτή η βασική θεωρία των τέλειων κρυστάλλων με μη αλληλεπιδρώντα σωμάτια μπορεί να εξηγήσει μόνο μερικές παρατηρήσιμες ιδιότητες των στερεών, παρέχει τις βασικές αρχές για την περισσότερη από τη Θεωρία Στερεάς Κατάστασης, εάν υποβοηθηθεί από την κινητική θεωρία η οποία υποθέτει ότι τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν μεταξύ τους και με τις διάφορες ατέλειες του πλέγματος.

Τα άτακτα υλικά δεν έχουν την περιοδικότητα των κρυστάλλων. Κατά συνέπεια, κάποιος θα περίμενε ότι όλα αυτά τα παγκόσμια χαρακτηριστικά των κρυσταλλικών υλικών που εξαρτώνται από τη συμμετρία μεταφοράς τους, δεν διατηρούνται. Παρόλα αυτά, είναι δυνατό να υπάρχουν αντίστοιχα παγκόσμια χαρακτηριστικά στην ηλεκτρονική δομή των άτακτων υλικών. Αν είναι έτσι, τότε ποια είναι;

Η θεωρία των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων σε στατικά άτακτα συστήματα έχει αναπτυχθεί αρκετά μόνο για την περίπτωση χαμηλής συγκέντρωσης των προσμίξεων. Σε αυτό το όριο, πολλαπλή σκέδαση από διαφορετικές προσμίξεις μπορεί να παραλειφθεί και το πρόβλημα μπορεί να αναχθεί σε αυτό με μόνο μία πρόσμιξη. Ακόμα και κάτω από συνθήκες όπου κάποιο κατάλληλο μέτρο της αταξίας δεν μπορεί να θεωρηθεί ασθενές, πολύ

κοινή περίπτωση σε πραγματικά υλικά με πρακτικό ενδιαφέρον, συνήθως προσεγγίζουμε τα άτακτα υπό μελέτη συστήματα με ένα 'ενεργό' περιοδικό σύστημα. Έτσι, μπορούμε να εφαρμόσουμε τη θεωρία του Bloch.

Στο κλασικό άρθρο του, 'Absence of Diffusion in Certain Random Lattices' ο P.W.Anderson το 1958, μελέτησε την κίνηση ενός ηλεκτρονίου σε ένα τυχαίο δυναμικό, έξω από τα πλαίσια της θεωρίας του Bloch και κατέληξε στο συμπέρασμα ότι η τυχειότητα, αν είναι αρκετά ισχυρή, μπορεί να παγιδεύσει το ηλεκτρόνιο σε μια περιορισμένη περιοχή του χώρου. Αυτό είναι γνωστό ως 'Πρόβλημα Εντοπισμού του Anderson'. Αν η αταξία είναι ασθενής, η κυματοσυνάρτηση έχει τη μορφή επίπεδου κύματος σε μικρή κλίμακα μήκους και φυσικά, χάνει τη συμφωνία φάσης - λόγω της σκέδασης από το τυχαίο δυναμικό -σε μεγάλα μήκη κλίμακας. Η χωρική απόσταση από την οποία η φάση της κυματοσυνάρτησης αποκλίνει αισθητά από αυτή ενός επιπέδου κύματος, ονομάζεται μέση ελεύθερη διαδρομή. Καθώς η αταξία μεγαλώνει, παρουσιάζονται επιπρόσθετες αλλαγές στη δομή της κυματοσυνάρτησης. Εμφανίζονται διακυμάνσεις στο πλάτος της οι οποίες γίνονται ισχυρότερες και μεγαλύτερης έκτασης καθώς η τυχειότητα αυξάνεται. Τελικά, μία (ή μερικές) από τις διακυμάνσεις μπορεί να κυριαρχήσουν και οι αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις υφίστανται ένα ποιοτικό μετασχηματισμό και γίνονται εντοπισμένες, ή μη διαδιδόμενες. Αυτό σημαίνει ότι το πλάτος τους, $|\psi(r)|$, τείνει στο μηδέν καθώς $|r| \rightarrow \infty$ συνήθως με εκθετική συμπεριφορά. Από φυσική άποψη, θα περιμέναμε οι καταστάσεις να γίνονται εντοπισμένες όταν η μέση ελεύθερη διαδρομή γίνεται συγκρίσιμη με το μήκος κύματος. Η κεντρική ερώτηση στη θεωρία του προβλήματος εντοπισμού του Anderson είναι πώς οι εκτεταμένες καταστάσεις γίνονται εντοπισμένες καθώς η αταξία αυξάνει. Η μελέτη του εντοπισμού τύπου Anderson, στα τελευταία τριάντα χρόνια ασχολήθηκε με θέματα όπως εντοπισμός κυματοσυναρτήσεων, όρια ευκινησίας, μορφοκλασματικές

κυματοσυναρτήσεις, που οδηγούν σε ένα διαφορετικό τρόπο περιγραφής των υλικών. Επίσης οδήγησε σε σημαντική απομάκρυνση από τη μέχρι τότε υπάρχουσα φιλοσοφία (θεώρημα του Bloch και θεωρία διαταραχών) που κυριαρχούσε στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης. Αυτές οι καινούριες ιδέες επεκτάθηκαν σε πολλά πεδία πέρα από την ηλεκτρονική δομή των υλικών. Η έρευνα στη φυσική των τυχαίων συστημάτων έχει αναπτυχθεί υπερβολικά την τελευταία δεκαετία.

Η εποχή πριν τη θεωρία κλίμακας

Ίσως η πρώτη εργασία στην οποία συζητήθηκε το πρόβλημα του εντοπισμού σε σχέση με κβαντομηχανική διάχυση, είναι εκείνη του P.W.Anderson(1958) (σχήμα 1 [Kramer and MacKinnon (1993)]). Εκεί περιέγραψε το πρόβλημα κι έδωσε μια πρώτη εκτίμηση του μεγέθους που χρειάζεται το τυχαίο δυναμικό, για την ‘απουσία διάχυσης σε κάποια τυχαία πλέγματα’. Ο εντοπισμός σε σχέση με τις ιδιότητες διάδοσης άμορφων ημιαγωγών συζητήθηκαν από τον Mott(1968). Αυτός πρότεινε την ιδέα των άκρων ευκινησίας που ξεχωρίζουν ενεργειακά τις εντοπισμένες καταστάσεις από τις εκτεταμένες (σχήμα 2 [Kramer and MacKinnon (1993)]). Εδώ η αγωγιμότητα πέφτει στο μηδέν για $T=0$ και $\omega=0$, κι έτσι το άκρο ευκινησίας αντιπροσωπεύει την κρίσιμη ενέργεια για τη μετάβαση από μεταλλική κατάσταση σε μονωτική (metal-insulator transition (MIT)).

Γύρω στο 1970, ο Thouless και άλλοι προσπάθησαν να διευκρινίσουν την ποσοτική όψη του προβλήματος [Thouless (1974)]. Ειδικότερα, η ιδέα της σχέσης ανάμεσα στην DC conductivity και την ευαισθησία των ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής ενός πεπερασμένου (αλλά πολύ μεγάλου) συστήματος σε αλλαγές των συνοριακών συνθηκών [Edwards and Thouless (1972), Licciardello and Thouless (1975 a,b)]. Αυτή η ιδέα ήταν που έβαλε τη βάση για την αναδιατύπωση του προβλήματος αργότερα, σε όρους

της ομάδας επανακανονικοποίησης και της αντίστοιχης θεωρίας κλίμακας από τον Wegner(1976), που τελικά είχε επιτυχία στο φορμαλισμό σε όρους του μη γραμμικού σ-μοντέλου [Wegner (1979 a,b), Hikami (1981), Efetov (1983)]. Έτσι ο κρίκος σύνδεσης ανάμεσα στις επαγόμενες λόγω αταξίας MIT και τις μεταβάσεις φάσεων δεύτερης τάξης, είχε επιτευχθεί.

Σε εαυτή κλίμακας

Η βασική υπόθεση της θεωρίας κλίμακας, είναι ότι κοντά στο σημείο μετάβασης μεταξύ εντοπισμένων και εκτεταμένων καταστάσεων, υπάρχει μόνο μία κατάλληλη μεταβλητή, η οποία είναι αρκετή για να περιγράψει την κρίσιμη συμπεριφορά της DC conductivity (στη μεταλλική πλευρά) και του μήκους εντοπισμού (στη μονωτική πλευρά). Από φυσικής πλευράς, αυτό είναι ισοδύναμο με το ότι κοντά στη μετάβαση δεν έχει νόημα να κάνουμε διάκριση ανάμεσα σε διάφορους μηχανισμούς για εντοπισμό.

Το 1970 ο Landauer έδειξε ότι αφού η DC conductivity σ μηδενίζεται στην εντοπισμένη περιοχή και σε $T=0$, δεν είναι πια χρήσιμη ποσότητα για την περιγραφή φαινομένων μεταφοράς μέσω πεπερασμένων συστημάτων. Αντί για αυτήν, ενδιαφέρει να υπολογίζεται η conductance $G = \sigma L^{d-2}$ στο κυβικό σύστημα L^d . Πρότεινε μια εναλλακτική περιγραφή της conductance για μονοδιάστατα (1d) άτακτα συστήματα, σε όρους των ιδιοτήτων μεταφορά τους. Η σχέση του Landauer [Landauer (1970)] δίνει ρητά

τις ιδιότητες κλίμακας της conductance, σαν συνάρτηση του μήκους του συστήματος. Σ' αυτή τη σχέση έχουν γίνει αρκετές γενικεύσεις σε ημι-1d συστήματα (με πολλά κανάλια μεταφοράς) [Anderson *et al* (1980), Langreth and Abrahams (1981), Fisher and Lee (1981), Economou and Soukoulis (1981 a,b), Thouless (1981), Anderson (1981), Büttiker *et al* (1985)]. Επίσης η προσέγγιση Landauer μπορεί να θεωρηθεί σαν ένας από τους προάγγελους της θεωρίας κλίμακας μιας παραμέτρου (one-parameter scaling theory).

Από την εργασία του Wegner και τις ιδέες των Thouless και Landauer, δημιουργήθηκε η θεωρία κλίμακας μιας παραμέτρου για τον εντοπισμό [Abrahams *et al* (1979), Gorkov *et al* (1979)], στην οποία έπαιρναν την ίδια την conductance σαν μεταβλητή κλίμακας. Σ' αυτή την εργασία κάπως διαισθητικά και με έναν ad hoc τρόπο για πρώτη φορά δόθηκε μια πλήρης περιγραφή της εξάρτησης της conductance από το μέγεθος του άτακτου συστήματος, και έγινε μια στοιχειώδης περιγραφή του ρόλου που παίζει η διάσταση του συστήματος.

Για την περιγραφή της αδιάστατης conductance $g(L)$, ενός υπερκύβου όγκου L^d , όρισαν τη λογαριθμική παράγωγο β :

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (3.1)$$

Θεώρησαν ότι το β εξαρτάται μόνο από την conductance, και όχι από την ενέργεια, την αταξία ή το L χωριστά. Θεωρώντας ότι η β είναι μονότονα αύξουσα συνάρτηση, μπορούμε να επιτύχουμε την ποιοτική συμπεριφορά της ενώνοντας στη γραφική παράσταση την ασυμπτωτική συμπεριφορά για μικρή και για μεγάλη conductance (σχήμα 3 [Kramer and MacKinnon (1993)]).

Αυτή η συμπεριφορά επιβεβαιώθηκε στη συνέχεια, με μια ποσοτική επέκταση από το όριο ασθενούς αταξίας [Vollhardt and Wölfle (1982)] χρησιμοποιώντας διαγραμματικές διαταρακτικές

τεχνικές για τον διαδότη δύο σωματίων. Ο ρόλος των αλληλεπιδράσεων μελετήθηκε από τους Hikami *et al* (1980), Finkelstein (1983 a,b,1984 a,b), Fukuyama (1985), Altschuler and Aronov (1979 a, b,1985), Castellani *et al* (1984) και Raimondi *et al* (1990).

Αν είναι $\beta > 0$, η conductance αυξάνει με την αύξηση του μεγέθους του συστήματος, δείχνοντας έτσι μια μεταλλική συμπεριφορά. Η περιοχή αυτή μεταλλικής συμπεριφοράς μπορεί να χαρακτηρίζεται από την κλασσική συμπεριφορά $\beta(g) = d-2$, η οποία βγαίνει από την κλασσική σχέση μεταξύ της conductance και της conductivity. Από την άλλη μεριά, αν είναι $\beta < 0$, η conductance $g(L)$ μειώνεται με την αύξηση του L , καταλήγοντας τελικά στην εντοπισμένη περιοχή όπου $\beta(g) = \ln g$. Ένα κρίσιμο σημείο ορίζεται από το $\beta(g_c) = 0$. Το σημείο αυτό αντιστοιχεί σε μετάβαση μετάλλου-μονωτή (MIT), που επάγεται λόγω της αταξίας. Ένα από τα σημαντικά αποτελέσματα της θεωρίας κλίμακας μιας παραμέτρου, είναι ότι μια τέτοια MIT μπορεί να υπάρχει μόνο στις τρεις διαστάσεις, αφού $3d$ είναι η μόνη διάσταση όπου το β μπορεί να έχει και θετικές και αρνητικές τιμές. Στις μία και δύο διαστάσεις, το $g(L)$ πάντα μειώνεται με το L , κι έτσι το άπειρο σύστημα τελικά συμπεριφέρεται σαν μονωτής (πάντα μιλάμε στο θερμοδυναμικό όριο, σε θερμοκρασία απόλυτο μηδέν, για μη αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια και χωρίς φαινόμενα σκέδασης λόγω μαγνητικού πεδίου).

Ενώ αναπτυσσόταν η θεωρία κλίμακας εντοπισμού, έγιναν γνωστές πειραματικές τεχνικές που έκαναν αρκετά τεστ στη θεωρία. Η ασυμπτωτική (διαταρακτική) θεωρία για ασθενή αταξία (ασθενής ελαστική σκέδαση) προέβλεψε μια λογαριθμική διόρθωση λόγω αταξίας, στην εξάρτηση της θερμοκρασίας από την conductivity, σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες για $2d$ συστήματα. Η αντίστοιχη ποσοτική θεωρία έγινε από τους Hikami *et al* (1980) και Altshuler *et al* (1980), και επιβεβαιώθηκε πειραματικά σε μια σειρά από

πειράματα που έγιναν σε πολύ λεπτά films από Mg [Bergmann (1982 a,b,c,1984)].

ζ οὐδὲ ἀπὸ τοῦ κρισιμο σημείο

Ένα άλλο σημαντικό αποτέλεσμα της θεωρίας κλίμακας μιας παραμέτρου αφορά την κρίσιμη συμπεριφορά στην MIT (μετάβαση Anderson). Αν υποθεθεί, σε αναλογία με τη δεύτερης τάξης θεωρία μετάβασης φάσεως, ότι η DC conductivity σ_{dc} και το μήκος εντοπισμού λ κοντά στα άκρα ευκινησίας, συμπεριφέρονται σαν

$$\begin{aligned}\sigma_{dc} &\propto (E - E_c)^s \\ \lambda &\propto (E_c - E)^{-\nu}\end{aligned}\tag{3.2}$$

τότε βρίσκουμε $s=\nu$ από τις σχέσεις κλίμακας. Η αριθμητική τιμή που υπολογίστηκε χρησιμοποιώντας την ϵ ανάπτυξη [Wegner (1985)] ή διαγραμματικές τεχνικές [Vollhardt and Wölfle (1982)], ήταν $s=\nu=1$.

Τα τελευταία χρόνια έχει ερευνηθεί πειραματικά [Thomas and Paalanen (1985), Thomas (1986), Katsumoto (1991)] η κρίσιμη συμπεριφορά της conductivity κοντά στη MIT σε doped ημιαγωγούς. Αυτά τα πειράματα έδωσαν αρκετές τιμές για τους εκθέτες ν και s , τις οποίες μπορούμε να τις κατατάξουμε στις παρακάτω δύο κατηγορίες: γύρω από την τιμή $s = \nu = \frac{1}{2}$ (χαρακτηριστικό παράδειγμα $Si:P$), και γύρω από την τιμή $s=\nu=1$ (χαρακτηριστικό

παράδειγμα $Al_xGa_{1-x}As$). Από τη μια μεριά, η τιμή 1 του εκθέτη δικαιολογήθηκε από τη σημερινή θεωρία εντοπισμού, πιστεύοντας ότι οφείλεται σε μετάβαση Anderson, ενώ από την άλλη μεριά, η τιμή $\frac{1}{2}$ αποδόθηκε στην παρουσία τοπικών μαγνητικών ροπών που επάγονται με αλληλεπίδραση Coulomb αν και το πρόβλημα παραμένει ανοιχτό. Για αυτόν τον τύπο μετάβασης, δεν υπάρχει προς το παρόν μια γενικά αποδεκτή θεωρία παρόλο που έχουν γίνει αρκετές προσπάθειες για τη θεωρητική μελέτη αυτού του φαινομένου [Belitz and Kirkpatrick (1989 a,b,1991), Kirkpatrick and Belitz (1989,1990 a,b), Milovanovic *et al* (1989), Bhatt *et al* (1988)].

Μια διαφορετική προσέγγιση του προβλήματος αναπτύχθηκε από τον Götze (1981), ο οποίος ξεκίνησε από την mode-coupling theory και υπολόγισε ποσότητες που μπορούν να παρατηρηθούν πειραματικά, όπως η conductivity που εξαρτάται από τη συχνότητα και η διηλεκτρική επιδεκτικότητα, σαν συνάρτηση των διαφόρων παραμέτρων του συστήματος όπως η αταξία και η ενέργεια Fermi [Götze (1985)]. Μ'αυτό τον τρόπο αναζητήθηκε μια εναλλακτική ποσοτική περιγραφή της μετάβασης Anderson.

Αριθμητική εργασία και θεωρία κλίμακας

Η θεωρία κλίμακας μιας παραμέτρου περιέχει κάποιες υποθέσεις, από τις οποίες η πιο σημαντική είναι η υπόθεση κλίμακας μιας παραμέτρου. Για να δουν αν πραγματικά ισχύει ή όχι αυτή η υπόθεση, οι MacKinnon and Kramer έκαναν ένα αριθμητικό τεστ [MacKinnon and Kramer (1981,1983a), MacKinnon (1985b)] χρησιμοποιώντας μια αναδρομική τεχνική, που αναπτύχθηκε σε συνδυασμό με τον υπολογισμό της conductivity άτακτων συστημάτων από τον MacKinnon (1980,1985a). Μια παρόμοια τεχνική αναπτύχθηκε ταυτόχρονα από τους Pichard and Sarma (1981a,b). Χρησιμοποίησαν στον πραγματικό χώρο μια τεχνική από τη θεωρία επανακανονικοποίησης την οποία συνέδεσαν με τις ιδέες των Landauer και Wegner, κι έτσι μπόρεσαν να βγάλουν αριθμητικά την ύπαρξη μιας συνάρτησης κλίμακας για το εκθετικά αποσβενόμενο μήκος λ_M της πιθανότητας διέλευσης μέσω ενός τυχαίου μέσου (σχήμα 10 [Kramer and MacKinnon (1993)]). Όμως, οι κρίσιμοι εκθέτες που υπολογίστηκαν, συμφωνούσαν μόνο εν μέρει με τα αποτελέσματα άλλων θεωριών και με τα πειραματικά δεδομένα που αναφέραμε παραπάνω.

Οι αριθμητικές τιμές για το μήκος εντοπισμού που υπολογίστηκαν κοντά στην κρίσιμη αταξία για $3d$ σύστημα και για μικρή αταξία σε $2d$ σύστημα, βγήκαν να είναι μακροσκοπικά μεγάλες. Το ερώτημα που προκύπτει είναι πώς συμπεριφέρονται οι κυματοσυναρτήσεις πριν αρχίσει η ασυμπτωτική εκθετική πτώση τους. Οι Kaveh and Mott (1981) εισήγαγαν την ιδέα ότι μειώνεται με αντίστροφο νόμο δύναμης, σαν συνάρτηση της απόστασης από κάποιο κέντρο εντοπισμού. Κάποια αριθμητικά αποτελέσματα που βγήκαν, φαίνεται να μη διαφωνούν με αυτή τη συμπεριφορά [Pichard and Sarma (1981a,b), Schreiber (1985)]. Εντοπισμός με νόμο δύναμης έχει βρεθεί επίσης σε $1d$ άτακτα συστήματα μέσα σε ηλεκτρικό πεδίο [Delyon *et al* (1984), Cota *et al* (1985), Leo and Movaghar (1988), Soukoulis *et al* (1983)]. Όμως, μια τέτοια συμπεριφορά θα ήταν σε πλήρη διαφωνία με τη θεωρία κλίμακας μιας παραμέτρου. Μάλλον

είναι απαραίτητες περαιτέρω αριθμητικές και θεωρητικές μελέτες για να διευκρινιστεί αυτό το σημείο.

Στοιχεία της θεωρίας εντοπισμού

Τα φαινόμενα συμβολής, τα οποία σε μικρή κλίμακα μήκους είναι υπεύθυνα για τις διακυμάνσεις στο πλάτος των ιδιοκαταστάσεων και τη μείωση της αγωγιμότητας που αυτές συνεπάγονται, αναγκάζουν επιπλέον τις ιδιοκαταστάσεις να φθίνουν στο μηδέν για πολύ μεγάλες αποστάσεις όπως φαίνεται [Anderson (1958)] και στο σχήμα 4 [Soukoulis and Economou (1993)]. Με άλλα λόγια η διαδικασία πολλαπλής σκέδασης παγιδεύει το σωματίο σε μια πεπερασμένη περιοχή του χώρου. Αυτή η παγίδευση, για ένα άπειρο σύστημα, υπαγορεύει απουσία διάδοσης και μηδενική τιμή της αγωγιμότητας και του συντελεστή διάχυσης. Αποδεικνύεται για μονοδιάστατα συστήματα, ότι όλες οι ιδιοκαταστάσεις είναι εντοπισμένες (πράγμα που εξ ορισμού σημαίνει ότι φθίνουν στο μηδέν για μεγάλες αποστάσεις) ανεξαρτήτως από το πόσο ασθενής είναι η αταξία (υπάρχουν μερικές παθολογικές περιπτώσεις) [Mott and Twose (1961), Economou (1983)]. Ο τρόπος με τον οποίο φθίνουν είναι εκθετικός και χαρακτηρίζεται από το μήκος εντοπισμού, L_c^{-1} , το οποίο ορίζεται μέσω της μέσης τιμής του λογαρίθμου της $|\psi(x)|$:

$$L_c^{-1} \equiv - \lim_{|x| \rightarrow \infty} (\langle \ln |\psi(x)| \rangle / |x|) \quad (4.1)$$

π.χ. $\langle |\psi(x)| \rangle \simeq \exp(-|x|/2 L_c)$. Μια εντοπισμένη κατάσταση δεν είναι κατ' ανάγκη επικεντρωμένη γύρω από ένα μόνο πλεγματικό σημείο αλλά μπορεί να έχει παγιδευτεί γύρω από ένα συσσωμάτωμα από πλεγματικά σημεία, σε αυτή την περίπτωση η εκθετική

απόσβεση παρουσιάζεται καθώς κινούμαστε έξω από αυτό. Σαν αποτέλεσμα, το μήκος L_c' πέρα από το οποίο ο εντοπισμός είναι ορατός, ισούται με $L_c + l_c$, όπου l_c είναι η γραμμική διάσταση του συσσωματώματος. Συνήθως, αλλά όχι πάντα, $l_c \ll L_c$, και $L_c' \simeq L_c$.

Είναι ευρέως αποδεκτό, παρόλο που δεν υπάρχει αναλυτική απόδειξη, ότι η κρίσιμη διάσταση για το πρόβλημα του εντοπισμού απουσία μαγνητικής σκέδασης ή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου είναι η $d=2$. Για $d < 2$, οσοδήποτε μικρό ποσό αταξίας είναι αρκετό να εντοπίσει όλες τις ιδιοκαταστάσεις (υπάρχουν παθολογικές καταστάσεις), ενώ για $d > 2$ πρέπει η αταξία να φτάσει μια κρίσιμη τιμή για να έχουμε εντοπισμό των ιδιοκαταστάσεων. Για $d=2$, ξεχωρίζουμε διάφορες τάξεις παγκοσμιότητας [Kramer *et al* (1990)]. Η κύρια κατηγορία, που είναι χρονικά αναλλοίωτη και χαρακτηρίζεται από απουσία σύζευξης σπιν-τροχιάς, αναμένεται ότι έχει όλες τις ιδιοκαταστάσεις εντοπισμένες ανεξάρτητα από το πόσο ασθενής είναι η αταξία, όπως και στην $1d$ περίπτωση. Παρουσία σύζευξης σπιν-τροχιάς ή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, χρειάζεται να έχουμε μια κρίσιμη τιμή της αταξίας ώστε όλες οι ιδιοκαταστάσεις να εντοπιστούν, όπως και στην $3d$ περίπτωση.

Η μετάβαση από εντοπισμένες (δηλ. αποσβυνόμενες) σε εκτεταμένες (δηλ. διαδιδόμενες) καταστάσεις εξαρτάται από τις παραμέτρους, W_i ($i=1,2,\dots$) οι οποίες χαρακτηρίζουν την ισχύ και τον τύπο της αταξίας και από την ενέργεια, E , της ιδιοκατάστασης. Στον χώρο $E, \{W_i\}$, μπορούμε να ορίσουμε μια υπερεπιφάνεια που διαχωρίζει τις περιοχές των εντοπισμένων από αυτές των εκτεταμένων καταστάσεων όπως φαίνεται σχηματικά στο σχήμα 5 [Soukoulis and Economou (1993)] για ένα περιοδικό σύστημα στο οποίο επιβάλλουμε αταξία. Οι κρίσιμες ενέργειες για τις οποίες έχουμε μετάβαση από εντοπισμένες σε εκτεταμένες καταστάσεις ονομάζονται *άκρα ευκινησίας*; η τροχιά που ακολουθούν καθώς

μεταβάλλουμε τα W_i είναι η έντονη γραμμή που φαίνεται στο σχήμα 5.

Το πρόβλημα εντοπισμού στα 1d συστήματα έχει μελετηθεί εκτεταμένα χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές [Thouless (1974), Esonomou (1983)]. Υπάρχουν ακριβή αναλυτικά και αριθμητικά αποτελέσματα που δίνουν τη σχέση εξάρτησης του μήκους εντοπισμού από την ενέργεια και την αταξία, την κατανομή πιθανότητας διαφόρων ενδιαφερουσών ποσοτήτων όπως οι συναρτήσεις Green, τη σχέση μεταξύ του μήκους εντοπισμού του σύμφωνου φασικού μήκους και του DOS, κ.τ.λ. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει ο συντελεστής διέλευσης, $|t|^2$, για ένα πεπερασμένο δείγμα μήκους L . Η μέση τιμή του λογαρίθμου του $|t|^2$ συμπεριφέρεται σαν $\exp(-2L/L_c)$ για $L/L_c \gg 1$, ενώ άλλες μέσες τιμές παρουσιάζουν διαφορετική συμπεριφορά (π.χ.

$\langle |t^{-2}| \rangle = \frac{1}{2} [1 + \exp(4L/L_c)]$, ενώ $\langle |t|^2 \rangle = C_2 (L_c/2L)^{3/2} \exp(-L/2L_c)$). Αυτό οφείλεται στις μακριές ουρές που παρουσιάζει η κατανομή πιθανότητας του $|t|^2$ λόγω των έντονων συντονισμών που επιδεικνύει το $|t|^2$ ως προς το E (όπου το $|t|^2$ σχεδόν πλησιάζει τη μονάδα). Αυτές οι καταστάσεις συντονισμού μετατρέπονται σε πλήρως εντοπισμένες καταστάσεις στο όριο $L \rightarrow \infty$.

Το ενδιαφέρον για το $|t|^2$ προέρχεται από τη σχέση του με την αντίσταση, R , του γραμμικού τμήματος. Ο Landauer (1957) έδειξε ότι

$$R = \frac{\pi \eta}{e^2} \frac{1 - |t|^2}{|t|^2} \quad (4.2)$$

$$R = \frac{\pi \eta}{e^2} \frac{1}{|t|^2} \quad (4.3)$$

Η διαφορά στις δύο εκφράσεις για το R παρουσιάζεται στην περίπτωση ενός σχεδόν τέλει αγωγού ($L \ll L_c$), όπου η πρώτη έκφραση γίνεται

$$R = \frac{\pi\eta}{e^2} (e^{2L/L_c} - 1) \simeq \frac{\pi\eta}{e^2} \frac{2L}{L} \ll \frac{\pi\eta}{e^2} \quad (4.4)$$

το οποίο είναι το κλασικό αποτέλεσμα (αν θεωρήσουμε ότι $L_c = 4l$, όπου l είναι η μέση ελεύθερη διαδρομή), ενώ η δεύτερη τείνει στο $\pi\eta/e^2$. Ο λόγος αυτής της διαφοράς είναι ότι η σχέση ρεύματος-πεδίου δεν είναι τοπική για βαλλιστική μετατόπιση, δηλ. όταν $L \ll L_c$ και σαν αποτέλεσμα, η αντίσταση του τμήματος εξαρτάται από το πώς είναι συνδεδεμένο με το κύκλωμα και με το τι συμβαίνει έξω από το κύκλωμα. Πρόσφατα πειράματα [Timp *et al.* (1989)] στις κβαντικές γραμμές έδειξαν την παρουσία πλατώ στην αγωγιμότητα σε τιμές ίσες με $e^2 n / \pi \eta$ ($n=1,2,\dots$) που αντιστοιχούν σε $1,2,\dots$ μονοδιάστατα κανάλια που φτάνουν την τιμή κορεσμού $e^2 / \pi \eta$.

Σχεδόν μονοδιάστατα συστήματα, παράλληλα συζευγμένων $1d$ καναλιών, έχουν επίσης μελετηθεί εκτεταμένα γιατί αντιστοιχούν σε ρεαλιστικά συστήματα όπως λεπτά σύρματα ή κβαντικές γραμμές σε επιφάνειες ημιαγωγών. Παράλληλα συζευγμένα $1d$ κανάλια διατεταγμένα πάνω σε ένα επίπεδο ώστε να σχηματίζουν λωρίδες ή στο χώρο ώστε να σχηματίζουν σύρμα τετραγωνικής διατομής, επιτρέπουν τη μελέτη συστημάτων μεγαλύτερης διάστασης με αξιόπιστες αριθμητικές μεθόδους. Πράγματι, καθώς το εύρος μιας λωρίδας, Ma , ή το εμβαδόν διατομής ενός σύρματος, $M^2 a^2$ αυξάνει, το σύστημα τείνει σε ένα $2d$ ή $3d$ σύστημα [Kramer *et al.* (1990)]. Αξίζει επίσης να σημειώσουμε και την ύπαρξη $1d$ σχεδόν περιοδικών ασύμμετρων συστημάτων (π.χ. απλά μοντέλα ισχυρής δέσμευσης με διαγώνια στοιχεία μήτρας $\varepsilon_n = \varepsilon_0 \cos(\pi \sigma n)$ όπου το σ είναι άρρητος αριθμός) τα οποία επιδεινούν μια ενδιαμέση συμπεριφορά μεταξύ περιοδικών και τυχαίων συστημάτων [Sokoloff (1985)]. Ποιο συγκεκριμένα, τα σχεδόν-περιοδικά $1d$ συστήματα επιτρέπουν την

ύπαρξη είτε εκτεταμένων (όταν $\varepsilon_0/V < 2$) είτε εντοπισμένων ιδιοκαταστάσεων (όταν $\varepsilon_0/V > 2$), όπου V είναι το στοιχείο μήτρας που επιτρέπει τη μεταφορά μεταξύ διπλανών γειτόνων.

Για άτακτα συστήματα υψηλότερης διάστασης, το πρόβλημα του εντοπισμού είναι σαφώς δύσκολο και πιο περίπλοκο. Υπάρχουν πολύ λίγα αναλυτικά αποτελέσματα. Παρόλα αυτά, υπάρχει μια πληθώρα προσεγγιστικών θεωρητικών μεθόδων όπως επίσης και αρκετά εξεζητημένες αριθμητικές τεχνικές.

Η πιο συστηματική προσέγγιση στο πρόβλημα του εντοπισμού βασίζεται στην απεικόνισή του σε ένα σίγμα-μοντέλο [Wegner (1976)] και στη χρήση τεχνικών θεωρίας πεδίου για να καθορίσουμε μια γενική συμπεριφορά κλίμακας. Μέσω τεχνικών από τη θεωρία επανακανονικοποίησης, μπορούμε να εξάγουμε παγκόσμιες ιδιότητες όπως κρίσιμοι εκθέτες, για διάσταση d κοντά στο 2. Αναπτύσσοντας διαταρακτικά σε δυνάμεις του $d-2$, εξάγουμε αποτελέσματα για τη $d=3$.

Μια διαφορετική προσέγγιση είναι να ξεκινήσουμε με την παρατήρηση ότι η διάδοση κύματος σε ένα απλό μοντέλο ισχυρής δέσμευσης πρέπει να εξαρτάται (εκτός από την ενέργεια) από μια απλή αδιάστατη παράμετρο, πιο συγκεκριμένα από το λόγο, $V/\delta\varepsilon$, του στοιχείου μήτρας V με το πάχος γραμμής της κατάστασης, $\delta\varepsilon$. Το τελευταίο είναι ανάλογο με την τυπική απόκλιση της κατανομής πιθανότητας για κάθε διαγώνιο στοιχείο μήτρας, ε_n . Εν συνεχεία χωρίζουμε το σύστημα σε υποθετικά μπλοκ (π.χ. κύβους) συνεχώς αυξανόμενης γραμμικής διάστασης L . Το ερώτημα που τίθεται είναι κατά πόσο μπορούμε ακόμα να ορίσουμε για κάθε block δύο ποσότητες, $V(L)$, και $\delta\varepsilon(L)$ οι οποίες να χαρακτηρίζουν πλήρως τις ιδιότητες εντοπισμού του συστήματος. Ο Thouless (1974) επιχειρηματολόγησε λέγοντας ότι το $\delta\varepsilon(L)$ είναι ουσιαστικά η απόσταση μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων, δηλ., $\delta\varepsilon(L) = \rho^{-1} L^{-d}$,

όπου το ρ είναι το DOS ανά μονάδα όγκου, και το $V(L)$, είναι η μέση αλλαγή στα ενεργειακά επίπεδα όταν οι συνοριακές συνθήκες σε ένα block αλλάζουν από περιοδικές σε αντιπεριοδικές. Επιπλέον, μπορεί κάποιος να δείξει ότι $V(L) = \eta/\tau'$, όπου τ' είναι ο χρόνος που χρειάζεται ένα σωματίο να διαχυθεί από το κέντρο του block μέχρι τα όρια του: $\tau' = (L/2)^2/D$, όπου D είναι ο συντελεστής διάχυσης. Βάζοντας όλα τα παραπάνω μαζί και με χρήση της σχέσης του Einstein $\sigma = 2e^2\rho D$ (σ είναι η αγωγιμότητα), εξάγουμε την θεωρούμενη αδιάστατη ποσότητα, η οποία χαρακτηρίζει πλήρως τις ιδιότητες του εντοπισμού, και είναι η αδιάστατη dc conductance $g = (\eta/e^2)G$. Η β -συνάρτηση που ορίζεται σαν

$$\beta \equiv \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (4.5)$$

αν είναι θετική (αρνητική) για $L > L_0$, συνεπάγεται ότι $G(L) \rightarrow \infty$ (μηδέν) καθώς το $L \rightarrow \infty$, δηλ. ότι οι ιδιοκαταστάσεις είναι εκτεταμένες (εντοπισμένες). Οι Abrahams *et al* (1979) υποστήριξαν ότι το β πρέπει αναγκαία να είναι συνάρτηση μόνο του g (για και υπάρχει μια απλή παράμετρος, συγκεκριμένα το g , το οποίο καθορίζει τον εντοπισμό). Επιπλέον υπέθεσαν ότι το β είναι μονότονη συνάρτηση του g . Αυτή η υποτιθέμενη μονοτονικότητα μαζί με τις οριακές εκφράσεις $g \sim \exp(-2L/L_c)$ (όταν το $g \rightarrow 0$) και $g \sim \sigma L^{d-2}$ (όταν το $g \rightarrow \infty$) οδηγεί σε μια σχέση του β ως προς $\ln g$ σύμφωνη με αυτή που φαίνεται στο σχήμα 3 για $d=1,2,3$. Για $d=1,2$, το β είναι πάντα μικρότερο από μηδέν. Έτσι, αυξάνοντας το L , το g ελαττώνεται και το β γίνεται περισσότερο αρνητικό, και έτσι κινούμαστε προς τα κάτω σε ισχυρότερο εντοπισμό καθώς το $L \rightarrow \infty$. Για την $3d$ περίπτωση, ξεχωρίζουμε τις ακόλουθες δύο περιπτώσεις: (i) $g > g_c$ (g_c υπολογίζεται περίπου να είναι 0.024). Τότε το β είναι θετικό, το g αυξάνει καθώς αυξάνουμε το L , πράγμα που οδηγεί σε επιπλέον αύξηση του β και έτσι κινούμαστε πάνω στην καμπύλη του β προς τις εκτεταμένες καταστάσεις και στην κλασική

συμπεριφορά μεταφοράς. (ii) $g < g_c$, σε αυτή την περίπτωση το β είναι αρνητικό και άρα, αυξάνοντας το L , κινούμαστε προς ισχυρό εντοπισμό.

Γνωστά αποτελέσματα για το πρόβλημα του εντοπισμού σε ισότροπα άτακτα συστήματα

Ακριβή αποτελέσματα για την περίπτωση του προβλήματος του ισχυρού εντοπισμού έχουν παραχθεί κυρίως από απλά μοντέλα ισχυρής δέσμευσης (με Χαμιλτονιανή της μορφής $\langle n|H|m \rangle = \varepsilon_n \delta_{n,m} + V [\delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1}]$, όπου $|n\rangle$ είναι ένα οιονεί-ατομικό τροχιακό εντοπισμένο γύρω από την πλεγματική θέση n , κατάλληλο για την περιγραφή απομονωμένων ζωνών. Η αταξία εισάγεται συνήθως θεωρώντας ότι τα ε_n είναι ανεξάρτητες (μερικές περιπτώσεις όπου έχουμε εξάρτηση μελετήθηκαν επίσης) τυχαίες μεταβλητές, καθεμία με κατανομή πιθανότητας, $p(\varepsilon_n)$. Συνήθεις επιλογές για το p είναι: η Γκαουσιανή που χαρακτηρίζεται πλήρως από την τυπική απόκλιση $\bar{\sigma}$, η τετραγωνική με ολικό πλάτος W (το $\bar{\sigma}$ σε αυτή την περίπτωση είναι ίσο με $W/\sqrt{12}$, και η διωνυμική κατανομή της μορφής $x\delta(\varepsilon_n + \varepsilon_0) + (1-x)\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_0)$ η οποία χαρακτηρίζεται από δύο παραμέτρους: το x και το ε_0 . Στο σχήμα 6 [Soukoulis and Economou (1993)], φαίνονται αποτελέσματα [Zdetsis et al, (1985)] για την τροχιά που ακολουθεί το άκρο ευκινησίας, την ακριβή τροχιά του άκρου ζώνης (L), και την προσεγγιστική τροχιά του άκρου ζώνης (σύμφωνα με τη CPA) στο πάνω $E-W$ ημιεπίπεδο για την περίπτωση

που το μοντέλο είναι ένα απλό μοντέλο ισχυρής δέσμευσης με τετραγωνική κατανομή για τα ε_n .

Η DOS μεταξύ CPA και L γραμμής είναι εξαιρετικά χαμηλή. Η συνεχής γραμμή για το άκρο ευκινησίας βασίζεται σε ένα συνδυασμό της CPA (για τον υπολογισμό του I και σ_0) και της PWA, ενώ τα σημεία που συμβολίζονται με τρίγωνα προέρχονται από μια αριθμητική μέθοδο κλίμακας (η γραμμοσκιασμένη περιοχή υποδεικνύει το υπολογίσιμο λάθος της τελευταίας). Το σχήμα 6 δείχνει ότι όταν το W υπερβεί μια κρίσιμη τιμή W_c ($W_c \simeq 16.5V$), ολόκληρη η ζώνη αποτελείται από δέσμιες μόνο καταστάσεις. Αυτή η μετάβαση, κατά την οποία όλες οι περιοχές με εκτεταμένες ιδιοκαταστάσεις σε μια συγκεκριμένη ζώνη εξαφανίζονται, ονομάζεται μετάβαση Anderson. Η μετάβαση Anderson υποδηλώνει ότι η δεδομένη ζώνη δεν συμβάλλει καθόλου στη διάχυση. Στο σχήμα 7α [Soukoulis and Economou (1993)], απεικονίζεται το ξ και L_c ως προς το E , δηλαδή, καθώς κινούμαστε κατά μήκος της οριζόντιας γραμμής του σχήματος 6 που συμβολίζεται με τελείες, ενώ στο σχήμα 7b [Soukoulis and Economou (1993)], απεικονίζονται οι ίδιες ποσότητες ως προς W , δηλαδή, καθώς κινούμαστε κατά μήκος της κάθετης γραμμής στο σχήμα 6. Η συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων που προέρχονται από δύο διαφορετικές μεθόδους είναι καλή [Zdetsis *et al.*(1985)]. Στο σχήμα 8 [Soukoulis and Economou (1993)], φαίνεται η αγωγιμότητα σ (μαζί με το προσεγγιστικό αποτέλεσμα του Born σ_{00} , και το αποτέλεσμα από τη CPA σ_0) ως προς το W για το προηγούμενο μοντέλο και για ενέργεια στο κέντρο της ζώνης. Ξανά, η συμφωνία μεταξύ PWA και της αριθμητικής μεθόδου κλίμακας είναι καλή [Economou *et al* (1985a)].

Αριθμητική Μέθοδος

Μέθοδος των Πινάκων Μεταφοράς

Η Χαμιλτονιανή Anderson [Anderson (1958)], μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + V \sum_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (5.1)$$

όπου τα διαγώνια στοιχεία ε_i είναι ανεξάρτητες τυχαίες μεταβλητές και το άθροισμα στα j γίνεται μόνο στους πρώτους γείτονες των i . Τα μη διαγώνια στοιχεία V είναι σταθερά, και μπορούμε να διαλέξουμε τις μονάδες έτσι ώστε $V=1$. Παίρνοντας την κυματοσυνάρτηση στη μορφή $|\psi\rangle = \sum_i a_i |i\rangle$ η εξίσωση Schrödinger για μονοδιάστατο σύστημα δίνει :

$$a_{i+1} = (E - \varepsilon_i) a_i - a_{i-1} \quad (5.2)$$

που είναι μια αναδρομική σχέση για τους συντελεστές a_i της κυματοσυνάρτησης. Σκοπός της μεθόδου των πινάκων μεταφοράς, είναι να λύσει τη γενικευμένη μορφή της εξίσωσης (5.2),

$$(5.3) \quad A_{n+1} = (E - H_n) A_n - A_{n-1} \quad \text{Οι μονάδες ενέργειας έχουν ορισθεί}$$

έτσι ώστε τα (σταθερά) μη διαγώνια στοιχεία της Χαμιλτονιανής να είναι μονάδα. H_n είναι η Χαμιλτονιανή της $n^{\text{οστης}}$ 'φέτας' $d-1$ διαστάσεων, από τη 'ράβδο' d διαστάσεων, όταν η 'φέτα' δεν είναι συζευγμένη με την υπόλοιπη 'ράβδο'. Όλες οι ποσότητες στην (5.3) είναι πίνακες που δρουν στον υπόχωρο $(d-1)$ διαστάσεων. Η εξίσωση (5.3) μπορεί να ξαναγραφεί στη μορφή :

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ A_n \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} A_n \\ A_{n-1} \end{pmatrix} \quad (5.4)$$

όπου T_n είναι ο πίνακας μεταφοράς

$$T_n = \begin{pmatrix} E - H_n & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Με δοσμένες αρχικές συνθήκες για τα A_0 και A_1 , η συμπεριφορά του A_n εξαρτάται από τον πίνακα

$M_n =$

Ο πίνακας M_n ικανοποιεί το θεώρημα του Oseledec, που λέει ότι στο όριο μεγάλου n ο πίνακας $(M_n \ M_n^+)^{1/n}$ συγκλίνει σε ένα οριακό πίνακα [Osledec (1968)]. Αυτό σημαίνει ότι το modulus των ιδιοτιμών του M_n και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα, προσδιορίζονται σ' αυτό το όριο.

Ο πίνακας M_n όταν δράσει σε κάποιο διάνυσμα θα συγκλίνει στη μεγαλύτερη ιδιοτιμή του M_n επί το ιδιοδιάνυσμά της. Οι ιδιοτιμές του M_n αυξάνουν εκθετικά αυξάνοντας το μήκος της 'ράβδου', δηλ. προχωρώντας σε μεγαλύτερα n , κι έτσι όταν ο λόγος της μικρότερης προς τη μεγαλύτερη ιδιοτιμή γίνει συγκρίσιμος με την ακρίβεια του computer που χρησιμοποιούμε, τότε η μικρότερη ιδιοτιμή χάνεται.

Όμως η ιδιοτιμή που μας ενδιαφέρει (στον ορισμό του μήκους εντοπισμού κ.τ.λ.) είναι η μικρότερη ιδιοτιμή του M_n .

Για να αποφύγουμε αυτή τη δυσκολία κάνουμε τον παρακάτω μετασχηματισμό [MacKinnon and Kramer (1983a)], που πρέπει να επαναλαμβάνεται (π.χ. κάθε 10 βήματα) αλλά όχι απαραίτητα σε κάθε βήμα. Το πόσο συχνά πρέπει να γίνεται αυτή η ορθοκανονικοποίηση των στηλών του πίνακα M_n εξαρτάται από τις τιμές των παραμέτρων του προβλήματος. Όσο πιο μεγάλες είναι οι τιμές των παραμέτρων που μπαίνουν στις μήτρες T_v τόσο πιο γρήγορα αυξάνουν οι τιμές των στοιχείων του πίνακα M_n , κι έτσι χρειάζεται ορθοκανονικοποίηση πιο σύντομα.

Ο μετασχηματισμός γίνεται για κάθε στήλη B_i του πίνακα M_n που είναι το γινόμενο n πινάκων μεταφοράς.

$$\bar{B}_i = \left(B_i - \sum_{j < i} (B_j B_i) B_j \right) / b^{(i)},$$

(5.7a)

$$b^{(i)} = |B_i - \sum_{j < i} (B_j B_i) B_j|$$

(5.7b) (στις εξισώσεις (5.7a) και (5.7b) παραλείψαμε το δείκτη n για απλότητα). Μέσω των (5.7a) και (5.7b) βλέπουμε ότι κάθε στήλη είναι ορθοκανονικοποιημένη ως προς τις προηγούμενές της. Η πρώτη στήλη συγκλίνει στο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη μεγαλύτερη ιδιοτιμή, η δεύτερη στήλη στην αμέσως μικρότερη ιδιοτιμή κ.τ.λ., μέχρι που η τελευταία στήλη συγκλίνει στο ιδιοδιάνυσμα που αντιστοιχεί στη μικρότερη ιδιοτιμή. Στην πράξη, επειδή οι πίνακες M_n και T_v είναι συμπλεκτικοί (δηλαδή οι ιδιοτιμές τους εμφανίζονται σε ζευγάρια που είναι η μία ιδιοτιμή το αντίστροφο της άλλης), δεν είναι απαραίτητο να υπολογίζουμε όλες τις ιδιοτιμές, αλλά μόνο τις μισές από αυτές.

Στο όριο του $n \rightarrow \infty$ ο πίνακας M_n τείνει σε έναν διαγωνοποιημένο πίνακα που έχει μη μηδενικά στοιχεία μόνο στη διαγώνιο, δηλαδή τις ιδιοτιμές του. Αν μιλάμε για μια τρισδιάστατη ράβδο $M^2 \times L$ τότε

για $L \rightarrow \infty$ οι ιδιοτιμές του πίνακα $M_L = \prod_{v=1}^L T_v$ είναι

$e^{\gamma_1 L}, e^{\gamma_2 L}, \dots, e^{\gamma_{M^2} L}, e^{-\gamma_1 L}, \dots, e^{-\gamma_{M^2} L}$ όπου L είναι το μήκος της ράβδου και γ_i είναι οι *Lyapunov* εκθέτες όπως ονομάζονται. Το πλήθος τους είναι $2M^2$ από τους οποίους οι μισοί είναι ίσοι με το αντίθετο των άλλων μισών, για τους οποίους ισχύει $\gamma_1 > \gamma_2 > \dots > \gamma_{M^2} > 0$. Ο

μικρότερος θετικός *Lyapunov* Εκθέτης (*L.E.*) είναι ο γ_{M^2} , άρα η

ιδιοκατάσταση που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή $e^{-\gamma_{M^2} L}$ είναι εκείνη που σβήνει πιο αργά στο άπειρο, δηλαδή εκτείνεται περισσότερο από τις άλλες. Σαν μήκος εντοπισμού για το σύστημα της 'ράβδου' $M^2 \times L$,

ορίζουμε το αντίστροφο του μικρότερου θετικού *L.E.*,

$\lambda_M =$

λίγα βήματα, το μήκος εντοπισμού λ_M για μια ράβδο διατομής M^2 και μήκους L μπορεί να υπολογιστεί [MacKinnon and Kramer (1983a)] σαν:

$$\lambda_M^{(L)} = \frac{L}{C_L^{(M^2)}} \quad (5.9) \text{ όπου}$$

$$C_L^{(M^2)} = \ln b_L^{(M^2)} + C_{L-1}^{(M^2)} \quad (5.10)$$

Οι σχέσεις (5.9) και (5.10) μπορούν να εφαρμοστούν για κάθε μία από τις M^2 ιδιοτιμές, αλλά εμάς μας ενδιαφέρει μόνο το μεγαλύτερο μήκος λ_M , το οποίο ξέρουμε ότι αντιστοιχεί στη μικρότερη ιδιοτιμή, και το ορίζουμε σαν μήκος εντοπισμού για τη ράβδο $M^2 \times L$.

Στο σχήμα 9 [MacKinnon and Kramer (1983a)] υπάρχουν αριθμητικά αποτελέσματα του κανονικοποιημένου μήκους

εντοπισμού $\frac{\lambda_M}{M}$ συναρτήσει του M για διάφορες τιμές της αταξίας $\frac{W}{V}$. Παρατηρούμε

αυτή μπορούμε να την καταλάβουμε ως εξής: Όταν το $\frac{\lambda_M}{M}$ μειώνεται συναρτήσει του M , σημαίνει ότι το λ_M τείνει να γίνει μικρό συγκρινόμενο με το M κι έτσι σε ένα άπειρα πλατύ σύστημα οι καταστάσεις θα παραμένουν εντοπισμένες. Όταν όμως το $\frac{\lambda_M}{M}$ αυξάνει συναρτήσει του M , τότε σημαίνει ότι το λ_M τείνει να γίνει μεγάλο συγκρινόμενο με το M κι έτσι οι καταστάσεις είναι εκτεταμένες σε ένα άπειρα πλατύ σύστημα.

Η υπόθεση κλίμακας

Ας ορίσουμε το κανονικοποιημένο μήκος εντοπισμού σε μια ράβδο $M \times M \times L$ σαν

$$\Lambda(M, W, E) = \frac{\lambda_M(W, E)}{M}, \quad (5.11)$$

όπου W είναι η αταξία και E η ενέργεια του συστήματος. Το Λ είναι το μήκος εντοπισμού εκφρασμένο σε μονάδες πλάτους της ράβδου.

Η βασική υπόθεση που γίνεται εδώ, είναι ότι η συμπεριφορά του Λ σε αλλαγές του μήκους $M \rightarrow bM$ εξαρτάται μόνο από το Λ και όχι από τα M ή W ή E χωριστά. Αυτή η υπόθεση μπορεί να γραφεί σαν

$$\frac{d \ln \Lambda}{d \ln M} = \chi(\ln \Lambda). \quad (5.12)$$

Αυτό είναι ισοδύναμο με τη συνθήκη ότι κάθε αλλαγή στο μήκος M

μπορεί να αντισταθμιστεί με αλλαγή στα W, E έτσι ώστε η Χαμιλτονιανή να παραμένει ουσιαστικά η ίδια. Ολοκληρώνοντας την (5.12) παίρνουμε τη βασική υπόθεση κλίμακας

$$A(M, W, E) = f\left(\frac{\xi(W, E)}{M}\right), \quad (5.13)$$

όπου η σταθερά ολοκλήρωσης $\xi(W, E)$ είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος που εξαρτάται από τα W, E αλλά όχι από το M .

i) Για μικρά Λ το πλάτος M της ράβδου είναι πολύ μεγαλύτερο από το λ_M , έτσι περιμένουμε ότι το λ_M έχει συγκλίνει στην τιμή ξ . Έτσι:

$$\begin{aligned} \chi(\ln \Lambda) &= -1, \\ A(M, W, E) &= \frac{\xi(W, E)}{M} \\ f(x) &= x \end{aligned}$$

(5.14) Σ' αυτή την περίπτωση, το χαρακτηριστικό μήκος $\xi(W, E)$ το ταυτίζουμε με το μήκος εντοπισμού άπειρου $3d$ συστήματος, $\lambda_\infty(W, E)$.

ii) Για μεγάλα Λ , το λ_M είναι πολύ μεγαλύτερο από το M και το κύμα που ταξιδεύει κατά μήκος της ράβδου είναι εξίσου διαδεδομένο σε όλη τη ράβδο. Σε κάθε φέτα της ράβδου, το κύμα βλέπει μια 'ενεργό αταξία' που είναι η στατιστική μέση τιμή της αταξίας μέσα στη φέτα. Το αποτέλεσμα της θεωρίας διαταραχών για $1d$ σύστημα [Thouless, D.(1979), Abrikosov and Ryzhkin (1978)] ισχύει κι εδώ επίσης, με την τροποποιημένη αταξία:

$$\begin{aligned} W'^2 &= \frac{W^2}{M^{d-1}} \\ \lambda_M &\sim W'^{-2} = W^{-2} M^{d-1} \end{aligned}$$

(5.15)

Από αυτές τις σχέσεις βγάζουμε τη συμπεριφορά των χ και f να είναι:

$$\begin{aligned}\chi(\ln \Lambda) &= d - 2, \\ \Lambda(M, W, E) &= \left(M / \xi(W, E) \right)^{d-2} \\ f(x) &= x^{2-d}\end{aligned}$$

(5.16)

Τι σημαίνει το $\xi(W, E)$ σ' αυτή την περίπτωση ; Ο συντελεστής διέλευσης T μιας πολύ μακριάς ράβδου μπορεί να γραφεί σαν

$T = \exp[-2L / \lambda_M(W, E)]$. Παίρνοντας τη σχέση του Landauer όπως ισχύει [Landauer (1970), Anderson *et al* (1980)] για την conductance g και τον T , έχουμε για μεγάλα g :

$$g \sim M^2 / L \xi(W, E). \quad (5.17)$$

Η σύγκριση με τις κλασικές σχέσεις ανάμεσα στην g και την conductivity σ μιας ράβδου μήκους L και διατομής M^2 , οδηγεί τελικά [MacKinnon and Kramer (1983α)] στην: $\sigma(W, E) = 1 / \xi(W, E)$. Δηλαδή σ' αυτή την περίπτωση το $\xi(W, E)$ σχετίζεται με την αντίσταση του $3d$ συστήματος.

Μέθοδος CPA + PWA

Σύνδεση του εντοπισμού με το πρόβλημα μιας δέσμιας κατάστασης σε πηγάδι δυναμικού

Έχει δειχθεί [Economou and Soukoulis (1983), Economou (1983), Economou *et al* (1984)] ότι υπάρχει μαθηματική σύνδεση ανάμεσα στο πρόβλημα του εντοπισμού για άτακτα συστήματα και στο πρόβλημα δέσμιων καταστάσεων σε πηγάδια δυναμικού. Το επιχείρημα που υποστηρίζει την παραπάνω πρόταση, μπορεί να περιγραφεί περιληπτικά ως εξής: Για $T=0$, η μέση τιμή της conductivity σ (η μέση τιμή είναι ως προς τις πολλές διαφορετικές διατάξεις του άτακτου πλέγματος) που είναι ανάλογη του $\langle Tr(\hat{p} \hat{G}_2 \hat{p} \hat{G}_2) \rangle$, συνήθως προσεγγίζεται με το $Tr(\hat{p} \langle \hat{G}_2 \rangle \hat{p} \langle \hat{G}_2 \rangle)$, κι έτσι βγαίνει η γνωστή έκφραση [Economou (1983)]

$$\sigma \approx \sigma_0 = \frac{2e^2 \eta}{\pi \Omega d} \sum_{\vec{k}} u^2(\vec{k}) \langle G_2(E, \vec{k}) \rangle^2$$

(5.18)

$\hat{G}_2(E)$ είναι το φανταστικό μέρος της συνάρτησης Green $\hat{G}(E) = (E - H)^{-1}$, \hat{p} είναι ο τελεστής της ορμής, d είναι η διάσταση, Ω ο όγκος του δείγματος, και $u(\vec{k}) = \partial E(\vec{k}) / \eta \partial \vec{k}$ είναι η ταχύτητα. Η σχέση (5.18) είναι γραμμένη για σύστημα με κυβική συμμετρία.

Το επόμενο βήμα είναι να αναγνωρίσουμε μια σειρά από όρους που τους αγνοήσαμε κάνοντας την προσέγγιση

$\langle \hat{G}_2 \hat{p} \hat{G}_2 \rangle \approx \langle \hat{G}_2 \rangle \hat{p} \langle \hat{G}_2 \rangle$. Αυτοί οι όροι [Gorkov *et al* (1979)], είναι γνωστοί σαν *maximally crossed diagrams*, και δίνουν μια διόρθωση στο σ_0 [Economou (1983)] της μορφής:

$$\delta\sigma \approx \sigma - \sigma_0 = -\frac{e^2}{\pi\eta} \frac{2}{(2\pi)^d} \int dk^\rho \frac{1}{k^2 - i\omega/D_0}$$

(5.19) όπου $D_0 = \sigma_0/2e^2\rho$ είναι ο συντελεστής διάχυσης, ρ είναι η πυκνότητα καταστάσεων (DOS) ανά μοναδιαία κυψελίδα και ανά spin, και πρέπει να πάρουμε το όριο $\omega \rightarrow 0$. Ένα παραπάνω βήμα έγινε από τους Vollhardt και Wölfle [Vollhardt and Wölfle (1982),(1980a)] που αντικατέστησαν το D_0 στο δεξί μέρος της (5.19) με $D = \sigma/2e^2\rho$, φτιάχνοντας έτσι μια αυτοσυνεπή εξίσωση για το σ σε όρους του σ_0 . Επίσης πρότειναν [Vollhardt and Wölfle (1982),(1980a)] ότι στην εντοπισμένη περιοχή, το $-i\omega/D(\omega)$ προσεγγίζει το λ^{-2} καθώς το $\omega \rightarrow 0^+$, όπου λ είναι το μήκος εντοπισμού. Κάνοντας αυτή την αντικατάσταση στη σχέση (5.19) και λαμβάνοντας υπόψη ότι $\sigma(\omega) \rightarrow 0$ όταν $\omega \rightarrow 0$, εξάγεται η εξίσωση :

$$\sigma_0 \rightarrow \frac{2e^2}{(2\pi)^d \pi\eta} \int \frac{dk^\rho}{k^2 + \lambda^{-2}}$$

(5.20) Οι Οικονόμου και Σούκουλης [Economou and Soukoulis (1983)] έδειξαν ότι αυτή η εξίσωση έχει ακριβώς την ίδια δομή με την εξίσωση που δίνει το μήκος που φθίνει μια ιδιοκατάσταση δέσμια σε ένα πηγάδι δυναμικού. Αυτή η παρατήρηση έχει μεγάλη σημασία, γιατί επιτρέπει σε κάποιον να παρακάμψει τον μάλλον πολύπλοκο φορμαλισμό στον οποίο βασίζεται η θεωρία εντοπισμού, και να ανάγει το πρόβλημα του εντοπισμού στο πιο βασικό και στοιχειώδες πρόβλημα της κβαντικής μηχανικής: το πρόβλημα μιας δέσμιας κατάστασης σ' ένα πηγάδι δυναμικού.

Coherent Potential Approximation (CPA)

Η βασική ιδέα της μεθόδου CPA είναι ότι αντικαθιστά το άτακτο μέσο με ένα ομογενές ενεργό μέσο, το οποίο προσδιορίζεται αυτοσυνεπώς. Ο τρόπος που προσδιορίζεται είναι ότι σε ένα σημείο του ενεργού μέσου αντικαθιστούμε τοπικά το πραγματικό μέσο (έτσι φτιάχνουμε μια ατέλεια στο ομογενές ενεργό μέσο), και στη συνέχεια απαιτούμε η ολική σκέδαση από αυτή την ατέλεια κατά μέσο όρο να είναι μηδέν. Ο μέσος όρος παίρνεται ως προς τις πολλές διαφορετικές ατέλειες που θα μπορούσαν να υπάρξουν στη θέση αυτή.

Σ' ένα σύστημα με τυχειότητα, αυτό που ενδιαφέρει είναι η μέση τιμή (ως προς όλες τις δυνατές διατάξεις), των φυσικών ποσοτήτων. Γι αυτό και ενδιαφέρει να υπολογιστεί η μέση τιμή $\langle G \rangle$ της συνάρτησης Green. Η CPA υπολογίζει την $\langle G \rangle$ μέσω μιας ενεργού Χαμιλτονιανής H_e , η οποία στην απλούστερη περίπτωση χαρακτηρίζεται από μια μιγαδική self-energy Σ , που εξαρτάται από την ενέργεια του συστήματος. Η CPA βασίζεται στην ανάπτυξη της G σε όρους του $G_e \equiv (E - H_e)^{-1}$ και του $H_1' \equiv H - H_e$, όπου H_e και G_e είναι η χαμιλτονιανή και η συνάρτηση Green που αντιστοιχούν στο ενεργό (effective) μέσο, ενώ H είναι η χαμιλτονιανή του πραγματικού άτακτου μέσου. Δηλαδή μαθηματικά η συνάρτηση Green G του πραγματικού άτακτου μέσου γράφεται [Economidou (1983)]

$$G = G_e + G_e T G_e$$

(5.21) όπου T είναι ο γνωστός από τη θεωρία διαταραχών τελεστής σκέδασης, ο οποίος περιέχει όλη την πληροφορία για τη σκέδαση ανάμεσα στο ομογενές (ενεργό) μέσο και το πραγματικό άτακτο μέσο.

Ο τελεστής T είναι μια πολύπλοκη συνάρτηση των t_n ,

$$T = f(\{t_n\})$$

(5.22) όπου τα
$$t_n = (\varepsilon_n - \Sigma) \left[I - (\varepsilon_n - \Sigma) G_e(n,n) \right]^{-1}$$

(5.23) αντιπροσωπεύουν τη σκέδαση από κάθε δομική μονάδα του άτακτου μέσου που περιβάλλεται από το ομογενές ενεργό μέσο που αντιστοιχεί στην G_e .

Η βασική προσέγγιση που κάνουμε στην CPA, είναι ότι προσεγγίζουμε το $\langle T \rangle = \langle f(\{t_n\}) \rangle$ με το $f(\{\langle t_n \rangle\})$. Δηλαδή:

$$\langle T \rangle \approx f(\{\langle t_n \rangle\})$$

(5.24) Παίρνοντας μέση τιμή στην (5.21) και λαμβάνοντας υπόψη ότι εξ ορισμού είναι $\langle G \rangle = G_e$, βγάζουμε ότι πρέπει

$$\langle T \rangle = 0$$

(5.25) Αυτή η απαίτηση του μηδενισμού της σκέδασης κατά μέσο όρο ανάμεσα στο ενεργό μέσο και το άτακτο πραγματικό μέσο, είναι η **βασική συνθήκη** για τον υπολογισμό του ενεργού μέσου (που χαρακτηρίζεται από το Σ) στα πλαίσια της CPA. Επειδή όμως το $\langle T \rangle$ δεν μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς, κάνουμε την προσέγγιση (5.24), η οποία μας οδηγεί σε μια πιο χαλαρή απαίτηση, δηλαδή

$$\langle t_n \rangle = 0$$

(5.26) όπου $\langle t_n \rangle$ είναι η μέση τιμή της σκέδασης από ένα σκεδαστή του άτακτου μέσου, ο οποίος περιβάλλεται από το ενεργό μέσο. Από

(5.23) και (5.26) $\Rightarrow \Rightarrow \left\langle \frac{\varepsilon_n - \Sigma}{I - (\varepsilon_n - \Sigma) G_e(n,n)} \right\rangle = 0 \Rightarrow$

$$\left\langle \frac{\varepsilon_n}{I - (\varepsilon_n - \Sigma) G_e(n,n)} \right\rangle = \frac{\Sigma}{\langle I - (\varepsilon_n - \Sigma) G_e(n,n) \rangle} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \Sigma = \left\langle \frac{\varepsilon_n}{I - (\varepsilon_n - \Sigma)G_e(n,n)} \right\rangle$$

(5.27) Η ποσότητα $G_e(n,n)$ εξαρτάται [Economidou (1983)] από το Σ σαν $G_e(n,n;E) = G_0(n,n;E - \Sigma)$, όπου G_0 είναι η Green συνάρτηση για το ομογενές σύστημα ισχυρής δέσμησης. Επομένως η σχέση (5.27) γράφεται

$$\Sigma = \left\langle \frac{\varepsilon_n}{I - (\varepsilon_n - \Sigma)G_0(n,n;E - \Sigma)} \right\rangle$$

(5.28) και είναι μια αυτοσυνεπής εξίσωση για τον υπολογισμό του Σ .

Το πραγματικό μέρος του Σ είναι μια μετατόπιση στην ενέργεια λόγω εξωτερικού πεδίου. Για $E=0$, το Σ δεν έχει πραγματικό μέρος. Το μιγαδικό μέρος του Σ σχετίζεται με το χρόνο εφησυχασμού τ μέσω της σχέσης

$$\tau = \frac{\eta}{2(\text{Im}\Sigma)}$$

(5.29).

Κεφάλαιο 6

Εντοπισμός σε ανισότροπα συστήματα

Με τον όρο 'ανισότροπα συστήματα', ονομάζουμε τα συστήματα που τα χαρακτηριστικά τους δεν είναι ίδια σε όλες τις διευθύνσεις του χώρου. Για παράδειγμα, ένα απλό κυβικό μοντέλο ισχυρής δέσμησης, όπου τα στοιχεία πίνακα μετάβασης από μια θέση στη γειτονική της έχουν όλα την ίδια τιμή, θα το λέγαμε ισότροπο σύστημα. Αν όμως, για παράδειγμα, τα στοιχεία πίνακα είχαν διαφορετική τιμή στην x -διεύθυνση απ'ότι στις διευθύνσεις y και z , τότε το σύστημα το λέμε ανισότροπο. Τα συστήματα που μελετάμε εδώ είναι όλα μοντέλα ισχυρής δέσμησης σε απλό κυβικό πλέγμα, με ανισοτροπία στα στοιχεία πίνακα μετάβασης μεταξύ πρώτων γειτόνων. Στο πρώτο μέρος της παρούσας εργασίας, μελετάμε α) μοντέλο όπου τα στοιχεία πίνακα μετάβασης στη μία διεύθυνση έχουν μια σταθερή τιμή που είναι μικρότερη από τη σταθερή τιμή των στοιχείων πίνακα στις άλλες δύο διευθύνσεις. Αυτό το μοντέλο μπορεί να περιγράψει ένα σύστημα ασθενώς συζευγμένων επιπέδων, γιατί οι δύο διευθύνσεις με τα μεγάλα στοιχεία πίνακα ορίζουν επίπεδα παράλληλα μεταξύ τους, τα οποία ενώνονται μέσω των ασθενών στοιχείων πίνακα που υπάρχουν στην τρίτη διεύθυνση κάθετα στα επίπεδα. Σ'αυτό το σύστημα μελετάμε τον εντοπισμό όταν ένα ηλεκτρονικό κύμα προχωρά είτε κατά τη διεύθυνση ασθενούς σύζευξης, δηλαδή κάθετα στα επίπεδα, είτε κατά μία διεύθυνση ισχυρής σύζευξης, δηλαδή παράλληλα στα επίπεδα, β) μοντέλο όπου τα στοιχεία πίνακα μετάβασης στις δύο διευθύνσεις έχουν μια σταθερή τιμή μικρότερη από τη σταθερή τιμή των

στοιχείων πίνακα στην τρίτη διεύθυνση. Το μοντέλο αυτό μπορεί να περιγράψει ένα σύστημα ασθενώς συζευγμένων αλυσίδων, γιατί τα μεγάλα στοιχεία πίνακα ορίζουν αλυσίδες παράλληλες μεταξύ τους, οι οποίες ενώνονται στις δύο άλλες διευθύνσεις μέσω των ασθενών στοιχείων πίνακα. Σ' αυτό το σύστημα μελετάμε τον εντοπισμό όταν ένα ηλεκτρονιακό κύμα προχωρά κατά τη διεύθυνση ισχυρής σύζευξης, ή κατά μία από τις διευθύνσεις ασθενούς σύζευξης αντίστοιχα.

Στο δεύτερο μέρος της παρούσας εργασίας, μελετάμε μοντέλα όπου τα στοιχεία πίνακα στη μία διεύθυνση (η οποία είναι και η διεύθυνση διάδοσης του ηλεκτρονιακού κύματος) έχουν τη σταθερή τιμή $V=1$ σε όλες τις θέσεις μεταξύ πρώτων γειτόνων. Στις άλλες δύο διευθύνσεις κάθε ένα από τα στοιχεία πίνακα μπορεί να πάρει τη σταθερή τιμή J με μια πιθανότητα c , ενώ με πιθανότητα $(1-c)$ αυτό το στοιχείο πίνακα παίρνει την τιμή μηδέν. Έτσι, στις δύο κάθετες διευθύνσεις υπάρχουν τα στοιχεία πίνακα J τοποθετημένα με έναν τυχαίο τρόπο (με μια ορθογώνια κατανομή πιθανότητας). Μελετάμε αυτό το μοντέλο για διάφορες τιμές του J μικρότερες ή μεγαλύτερες της μονάδας και για διάφορες τιμές της πιθανότητας c . Τα στοιχεία πίνακα $V=1$ που υπάρχουν στη μία διεύθυνση ορίζουν αλυσίδες παράλληλες μεταξύ τους, που συνδέονται στις άλλες δύο διευθύνσεις μέσω των στοιχείων πίνακα J που είναι τυχαία κατανεμημένα στον χώρο. Αυτό το μοντέλο μπορεί να περιγράψει (με κάποια προσέγγιση) ένα σύστημα πολυμερών, όπου τα μακρομόρια είναι συνδεδεμένα μεταξύ τους με κάποια στοιχεία μετάβασης J τυχαία κατανεμημένα στον χώρο.

ΜΕΡΟΣ Ι: $\text{I}\ddot{\alpha}\ddot{\epsilon}\acute{\Upsilon}\acute{\omicron}\varsigma$ $\acute{\alpha}\acute{\omicron}\acute{\epsilon}\acute{\alpha}\acute{\iota}\rho\acute{\omicron}$ $\acute{\omicron}\acute{\delta}\acute{\alpha}\acute{\omicron}\acute{\delta}\acute{\alpha}\acute{\iota}\acute{\Upsilon}\acute{\iota}\acute{\Upsilon}\acute{\iota}$ $\acute{\alpha}\acute{\delta}\acute{\epsilon}\acute{\omicron}\acute{\Upsilon}\acute{\alpha}\acute{\Upsilon}\acute{\iota}$ $\acute{\epsilon}\acute{\alpha}\acute{\epsilon}$ $\acute{\alpha}\acute{\epsilon}\acute{\omicron}\acute{\delta}\acute{\omicron}\acute{\beta}\acute{\alpha}\acute{\Upsilon}\acute{\iota}$

Σ' αυτό το μέρος της εργασίας, έχουμε μελετήσει συστηματικά τις ιδιότητες εντοπισμού τρισδιάστατων ανισότροπων συστημάτων, τα οποία μπορούν να περιγράψουν σύστημα συζευγμένων επιπέδων, και σύστημα συζευγμένων αλυσίδων. Τα συστήματα αυτά περιγράφονται με ένα μοντέλο ισχυρής δέσμευσης σε απλό κυβικό πλέγμα, με επιτρεπτές μεταβάσεις μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων. Τα στοιχεία πίνακα μετάβασης έχουν την ίδια τιμή στις δύο διευθύνσεις, ενώ στην τρίτη διεύθυνση έχουν μια άλλη σταθερή τιμή. Όταν η τιμή των στοιχείων πίνακα στις δύο διευθύνσεις είναι ίση με μονάδα, ενώ στην τρίτη διεύθυνση έχουν μια τιμή μικρότερη της μονάδας, τότε το μοντέλο μπορεί να περιγράψει σύστημα συζευγμένων επιπέδων. Όταν τα στοιχεία πίνακα σε μια διεύθυνση είναι ίσα με μονάδα, ενώ στις δύο άλλες διευθύνσεις η τιμή τους είναι μικρότερη από μονάδα, τότε το μοντέλο μπορεί να περιγράψει σύστημα συζευγμένων αλυσίδων. Μελετήσαμε τα συστήματα αυτά, για διάδοση του ηλεκτρονιακού κύματος παράλληλα ($//$) και κάθετα (\perp) στα επίπεδα και στις αλυσίδες. Τα βασικά συμπεράσματα για σύστημα συζευγμένων επιπέδων είναι τα εξής:

Η μετάβαση μετάλλου-μονωτή είναι ανεξάρτητη από τη διεύθυνση μετάβασης.

Στο κρίσιμο σημείο, ο γεωμετρικός μέσος όρος των λόγων των μηκών εντοπισμού πεπερασμένου συστήματος προς το πλάτος του συστήματος, είναι ανεξάρτητος από την ανισοτροπία.

Η κρίσιμη αταξία W_c για σύζευξη επιπέδων φαίνεται να εξαρτάται από την ανισοτροπία t σαν $t^{1/4}$, σε διαφωνία με την αναμενόμενη (Παράρτημα A2 αναφορά [23]) λογαριθμική εξάρτηση. Η αναλυτική μας εργασία στο ανισότροπο αυτό σύστημα υποστηρίζει τη σχέση αυτή, την οποία καταρχήν βρήκαμε αριθμητικά.

Ο κρίσιμος εκθέτης του μήκους εντοπισμού είναι ίσος με αυτόν του ισότροπου συστήματος, και για τις δύο διευθύνσεις διάδοσης.

Η διαφορά μεταξύ των μηκών συσχέτισης στις διαφορετικές διευθύνσεις διάδοσης, πιθανόν μπορεί να δώσει μια εξήγηση στις ιδιότητες διάδοσης στην *normal state* των *high- T_c* υπεραγωγών [Παράρτημα A2].

Από τη μελέτη των συζευγμένων αλυσίδων, έχουμε επίσης ότι η μετάβαση μετάλλου-μονωτή είναι ανεξάρτητη από τη διεύθυνση διάδοσης, και ότι στο κρίσιμο σημείο ο γεωμετρικός μέσος όρος των $\frac{\lambda_M}{M}$ είναι σταθερός για διαφορετικές διευθύνσεις και δεν εξαρτάται από την ανισοτροπία. Η κρίσιμη αταξία W_c εξαρτάται από την ανισοτροπία t σαν $t^{1/2}$, σε συμφωνία με προηγούμενες μελέτες [Panayotides *et al* (1994)].

Τα συστήματα που περιγράψαμε παραπάνω, τα έχουμε μελετήσει αριθμητικά χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς, και αναλυτικά χρησιμοποιώντας το συνδυασμό της PWA και CPA. Η μελέτη και περιγραφή όλων των παραπάνω συμπερασμάτων, όπως και σχήματα που υποστηρίζουν και τεκμηριώνουν τη μελέτη αυτή, βρίσκονται στα παραρτήματα A1 και A2. Παρακάτω θα δώσουμε μερικές επιπλέον εξηγήσεις και λεπτομέρειες της μελέτης αυτής μόνο σε όποια σημεία χρειάζεται και δεν θα επαναλάβουμε όλα όσα είναι γραμμένα στα παραρτήματα A1 και A2. Ξεκινάμε πρώτα με το κεφάλαιο 'Αριθμητική εργασία' στο οποίο γράφουμε

συμπληρωματικές πληροφορίες για την αριθμητική μας εργασία, και στη συνέχεια στο κεφάλαιο 'Αναλυτική εργασία' συμπληρώνουμε ό,τι πληροφορίες και πράξεις αφορούν την αναλυτική μας εργασία.

Αριθμητική εργασία

Σε όλη αυτή την παράγραφο αριθμητικής εργασίας εδώ, αναφερόμαστε σε σύστημα συζευγμένων επιπέδων και δίνουμε επιπλέον εξηγήσεις και πληροφορίες από τη μελέτη που έχει δοθεί στα παραρτήματα A1 και A2.

Ένα σύστημα συζευγμένων επιπέδων μπορεί να περιγραφεί από ένα μοντέλο ισχυρής δέσμευσης σε απλό κυβικό πλέγμα, με επιτρεπτή μετάβαση μόνο μεταξύ πρώτων γειτόνων, και που τα στοιχεία πίνακα μετάβασης σε δύο διευθύνσεις είναι ίσα με τη μονάδα, ενώ στην τρίτη διεύθυνση έχουν μία άλλη τιμή μικρότερη της μονάδας. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος περιγράφεται από την εξίσωση (1) του παραρτήματος A1. Μελετάμε το σύστημα αυτό για διάδοση του ηλεκτρονιακού κύματος παράλληλα ($//$) και κάθετα (\perp) στα επίπεδα. Στα παραρτήματα A1 και A2 περιγράφεται αναλυτικά ο συμβολισμός και οι εξισώσεις που περιγράφουν το σύστημα.

Στο σχήμα 1(c,d) του παραρτήματος A1 φαίνονται αριθμητικά αποτελέσματα που έχουμε πάρει με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς για ανισοτροπία $t=0.1$, δηλαδή το στοιχείο πίνακα σύζευξης των επιπέδων προς το στοιχείο πίνακα μετάβασης μέσα στο επίπεδο είναι 0.1 . Το σχήμα 1c είναι για διάδοση ηλεκτρονίου

παράλληλα στα επίπεδα, δηλαδή προχωρώντας σε μια διεύθυνση με στοιχεία πίνακα μετάβασης ίσα με 1. Στο σχήμα 1d, όπου η διάδοση γίνεται κάθετα στα επίπεδα με ανισοτροπία $t=0.1$, οι υπολογισμοί έγιναν θεωρώντας ότι τα στοιχεία πίνακα στη διεύθυνση διάδοσης είναι ίσα με 1 ενώ τα στοιχεία πίνακα στις δύο κάθετες διευθύνσεις είναι 10 κι έτσι ο λόγος του μικρού προς το μεγάλο στοιχείο πίνακα μας δίνει ανισοτροπία $t=0.1$. Δηλαδή τελικά κανονικοποιούμε όλες τις ενέργειες ως προς το μεγαλύτερο στοιχείο πίνακα.

Συζήτηση για τον λόγο $\frac{g^\perp}{g^\parallel}$

Στα σχήματα 1a και 1b του A2 φαίνεται η conductance όπως υπολογίστηκε μέσω της multichannel Landauer formula [Economou and Soukoulis (1981),

Fisher and Lee (1981)] $G(M) = (e^2/h)Tr(T^+T)$, όπου T είναι ο transmission matrix για ένα κύβο διαστάσεων $M \times M \times M$ (έχομε ορίσει με g την αδιάστατη conductance, η οποία συνδέεται με την conductance G μέσω της σχέσης $G = \frac{e^2}{h}g$). Όπως παρατηρούμε από

αυτά τα αριθμητικά αποτελέσματα, ο λόγος $\frac{g_c^\perp}{g_c^\parallel}$ είναι της τάξης του

10^{-7} , δηλαδή είναι πολύ πιο ισχυρή εξάρτηση απ' ό,τι το $g_c^\perp \approx t^2 g_c^\parallel$ που προβλέπεται από διαγραμματική ανάλυση [Wölfle and Bhatt (1984), Bhatt et al (1985)] ανισότροπου μοντέλου, και από τα απλά επιχειρήματα της αναφοράς [19] του παραρτήματος A2. Η σχέση

$\frac{g^\perp}{g^\parallel} \approx \frac{\xi^\parallel}{\xi^\perp} \approx t^2$ ισχύει μόνο στο όριο ασθενούς σκέδασης. Γενικά, μέσω

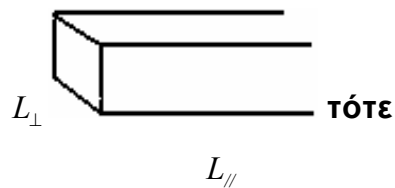
της σχέσης $g = 4 \left(\frac{I}{e^{2M/\lambda_M} - 1} \right)$ παίρνουμε το λόγο:

$$\frac{g^\perp}{g^\parallel} = \frac{\exp(2L_\parallel/\lambda_M^\parallel) - 1}{\exp(2L_\perp/\lambda_M^\perp) - 1}$$

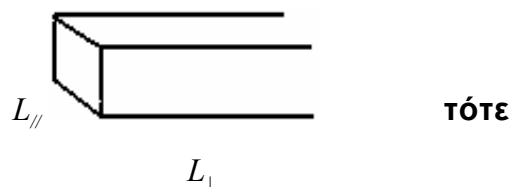
(6.1) όπου L_\parallel και L_\perp είναι το μήκος του συστήματος που παίρνουμε στον υπολογισμό, στη διεύθυνση παράλληλη με τα επίπεδα και κάθετα με τα επίπεδα αντίστοιχα. Λαμβάνοντας υπόψη ότι

$\frac{\lambda_M}{M} = \alpha + \frac{M}{\xi}$, όπου α είναι μια σταθερά, μπορούμε να γράψουμε ότι

$\lambda_M \sim \frac{M^2}{\xi}$. Αν το σύστημα είναι:



$\lambda_M^\parallel \sim \frac{L_\perp^2}{\xi^\parallel}$, ενώ αν κάνουμε υπολογισμούς για το σύστημα



$\lambda_M^\perp \sim \frac{L_\parallel^2}{\xi^\perp}$. Έτσι η σχέση (6.1) γίνεται: $\frac{g^\perp}{g^\parallel} = \frac{\exp(2L_\parallel \xi^\parallel / L_\perp^2) - 1}{\exp(2L_\perp \xi^\perp / L_\parallel^2) - 1}$.

Αν τώρα οι υπολογισμοί γίνονται σε κυβικό σύστημα, όπως οι υπολογισμοί για την conductance που έγιναν σε κυβικό σύστημα

$M \times M \times M$, τότε είναι $L_{\perp} = L_{//} = L$ και η παραπάνω σχέση για το λόγο των conductance παίρνει τη μορφή

$$\frac{g^{\perp}}{g^{//}} = \frac{\exp(2\xi^{//}/L) - 1}{\exp(2\xi^{\perp}/L) - 1} \quad (6.2)$$

Από τα αριθμητικά αποτελέσματα του σχήματος (2) του παραρτήματος A1, βλέπουμε ότι για ασθενή αταξία (μικρότερη από την κρίσιμη αταξία $W_c \sim 8.5$) είναι $\xi^{\perp} \gg \xi^{//}$. Σ' αυτή την περιοχή, αν πάρουμε το μέγεθος του συστήματος L να είναι πολύ μεγαλύτερο από τα ξ , δηλαδή $L \gg \xi^{\perp} \gg \xi^{//}$, μπορούμε να αναπτύξουμε αριθμητή και παρονομαστή στη σχέση (6.2) και να πάρουμε το σωστό όριο

ασθενούς σκεδάσεως
$$\frac{g^{\perp}}{g^{//}} \simeq \frac{\xi^{//}}{\xi^{\perp}} \simeq t^2 \quad (6.3)$$
 Αν

όμως το μέγεθος του συστήματος L δεν είναι αρκετά μεγάλο, όπως συμβαίνει με τους αριθμητικούς μας υπολογισμούς για την conductance, όπου το L πήρε τιμές μέχρι $L=20$ λόγω των ορίων που μπαίνουν από τους διαθέσιμους υπολογιστές, τότε το όριο για το

λόγο $\frac{g^{\perp}}{g^{//}}$ είναι διαφορετικό. Για παράδειγμα, όταν $W=2$ είναι $\xi^{//} \simeq 1$ και $\xi^{\perp} \simeq 20$, δηλαδή

W μεταξύ $W=2$ και $W=7$ περίπου, είμαστε στο όριο όπου

$\xi^{//} \ll L \ll \xi^{\perp}$, ενώ για $W > 7$, φαίνεται από το σχήμα (2) του A1 ότι και το ξ^{\perp} έχει αυξηθεί αρκετά, ώστε να είμαστε τελικά στο όριο όπου

$L \ll \xi^{//} \ll \xi^{\perp}$. Για την περιοχή τιμών όπου $\xi^{//} \ll L \ll \xi^{\perp}$, παίρνουμε

το όριο της σχέσης (6.2) που μας δίνει ότι $\frac{g^{\perp}}{g^{//}} \simeq \left(\frac{2\xi^{//}}{L}\right) \exp\left(\frac{-2\xi^{\perp}}{L}\right)$, ενώ

για την περιοχή τιμών όπου $L \ll \xi^{//} \ll \xi^{\perp}$ το όριο της σχέσης (6.2)

είναι: $\frac{g^{\perp}}{g^{//}} \simeq \exp\left[\frac{2}{L}(\xi^{//} - \xi^{\perp})\right] \simeq \exp\left(\frac{-2\xi^{\perp}}{L}\right)$. Παρατηρούμε ότι σ' αυτά τα

όρια του $\frac{g^{\perp}}{g^{//}}$ η εξάρτηση από τα ξ είναι διαφορετική από το $\frac{\xi^{//}}{\xi^{\perp}}$ που

φαίνεται στη σχέση (6.3). Αυτός είναι ο λόγος που στο σχήμα (1) του

A1 φαίνεται μια εξάρτηση της μορφής $g_c^\perp \simeq 10^{-7} g_c''$ στο κρίσιμο σημείο για ανισοτροπία $t=0.1$, και όχι $g_c^\perp \simeq t^2 g_c''$.

Συζήτηση για τον υπολογισμό και το σφάλμα του γ_{min}

Τα αριθμητικά αποτελέσματα τα πήραμε από αριθμητικούς υπολογισμούς με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς σε δείγματα μήκους $L \geq 1000$, και παίρνοντας μέση τιμή σε 20 διαφορετικά δείγματα. Ο υπολογισμός σταματούσε όταν το μήκος L ήταν αρκετό, ώστε το σχετικό σφάλμα στον ελάχιστο Lyapunov εκθέτη γ_{min} να είναι μικρότερο από περίπου 0.7%. Αυτό σημαίνει ότι στους περισσότερους υπολογισμούς το μήκος L ήταν μεγαλύτερο από 5000, και μερικές φορές έφτανε και τις 20000 με 30000. Σε λίγες περιπτώσεις όπου ο γ_{min} είχε πολύ μικρή τιμή (της τάξης του 10^{-3}), το σχετικό σφάλμα υπολογισμού του $\frac{\Delta\gamma_{min}}{\gamma_{min}}$ ήταν αρκετά μεγάλο, παρόλο που το μήκος L είχε πάρει ήδη μια μεγάλη τιμή (μερικές δεκάδες χιλιάδες σημεία πλέγματος). Στις περιπτώσεις αυτές σταματήσαμε τον υπολογισμό έστω και αν το σχετικό σφάλμα δεν ήταν μικρότερο από 1%, αλλά σημειώσαμε το σφάλμα του υπολογισμού του γ_{min} , και το λάβαμε υπόψη σε περαιτέρω υπολογισμούς. Επίσης, σε λίγες περιπτώσεις όπου η τιμή του γ_{min} ήταν μεγάλη και το σχετικό σφάλμα $\frac{\Delta\gamma_{min}}{\gamma_{min}}$ ήταν μικρότερο από 0.7%, το μήκος υπολογισμού L έμεινε ίσο με 1000 (και πήραμε μέση τιμή σε 20 διαφορετικά δείγματα).

Ο υπολογισμός του γ_{min} παίρνοντας μέση τιμή σε 20 δείγματα, κάποιου μήκους π.χ. $L=5000$, είναι σχεδόν ισοδύναμος με τον υπολογισμό του γ_{min} σε ένα δείγμα μήκους $L'=5000 \times 20=100000$. Αυτό μπορούμε να το καταλάβουμε ως εξής: Καθένα από τα 20 διαφορετικά δείγματα ξεκινά τον υπολογισμό από μια αρχική τυχαία μήτρα, πάνω στην οποία αρχίζει να πολλαπλασιάζεται ο πρώτος πίνακας μεταφοράς T_1 , και στο αποτέλεσμα πολ/ζεται ο επόμενος πίνακας μεταφοράς T_2 κ.ο.κ. Δηλαδή οι αρχικές συνθήκες του προβλήματος είναι ένας πίνακας με στοιχεία τυχαίους αριθμούς του οποίου απλώς έχουμε ορθοκανονικοποιήσει τις στήλες. Όμως και ο πίνακας που προκύπτει μετά από τον πολ/σμό των 5000 πρώτων πινάκων μεταφοράς, και αφού ορθοκανονικοποιηθούν οι στήλες του, είναι ένας πίνακας που θα μπορούσε να αποτελέσει την αρχική συνθήκη για το επόμενο δείγμα όπως λέμε, δηλαδή το αποτέλεσμα πολ/σμού των 10000 πρώτων πινάκων θα μπορεί να θεωρηθεί σαν το αποτέλεσμα του δεύτερου δείγματος μήκους 5000 πλεγματοκλών θέσεων. Έτσι, το αποτέλεσμα μετά τον πολ/σμό 100000 πινάκων μεταφοράς μπορεί να θεωρηθεί σαν το αποτέλεσμα του 20ου δείγματος μήκους 5000 πλεγματοκλών θέσεων. Θα μπορούσε λοιπόν να γίνει ο υπολογισμός κρατώντας την τιμή του γ_{min} ανά 5000 πολ/σμούς πινάκων μεταφοράς, και παίρνοντας στο τέλος μια μέση τιμή μεταξύ αυτών των 20 τιμών. Επειδή όμως με τον τρόπο αυτό του υπολογισμού σε μια αλυσίδα 100000 πλεγματοκλών θέσεων, το κάθε 'δείγμα' μήκους 5000 ξεκινάει με αρχικές τιμές το αποτέλεσμα του προηγούμενου 'δείγματος', έχει κρατηθεί κάποια 'μνήμη' και το αποτέλεσμα του δεύτερου δείγματος, για παράδειγμα, είναι περισσότερο βελτιωμένο από το αποτέλεσμα του πρώτου. Έτσι είναι κάτι σαν να έχουμε ήδη πάρει τη μέση τιμή μεταξύ αυτών των 'δειγμάτων'. Έχουμε κάνει κάποιους υπολογισμούς των Lyapunov εκθετών χρησιμοποιώντας από ένα δείγμα μήκους 100000, και μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με τους αντίστοιχους υπολογισμούς των 20 διαφορετικών ανεξάρτητων δειγμάτων μήκους $L \geq 5000$. Οι υπολογισμοί αυτοί χρησιμοποιήθηκαν για τον

υπολογισμό του εκθέτη ν , και δίνονται σε επόμενες παραγράφους. Μόνο στην περίπτωση όπου $M=17$, το μήκος των δειγμάτων ήταν 4000 και πήραμε μέση τιμή σε 32 διαφορετικά δείγματα. Αυτό έγινε γιατί ο υπολογισμός για τα $M=17$ αποτελέσματα χρειάζεται πολύ CPU χρόνο για να ολοκληρωθεί, κι έτσι κάναμε τους υπολογισμούς σε παράλληλα n-cube μηχανήματα, χρησιμοποιώντας 32 διαφορετικά nodes, και για να μην πάρει πάρα πολύ χρόνο, πήραμε μήκος μόνο 4000. Οι υπολογισμοί για $M=17$ θα ήταν σχεδόν αδύνατοι στους υπόλοιπους υπολογιστές που ήταν διαθέσιμοι και κάναμε τους άλλους μας υπολογισμούς για $M < 17$.

Υπολογισμός της g μέσω Lyapunov εκθετών

Οι Lyapunov εκθέτες μπορούν να χρησιμοποιηθούν κατευθείαν για τον υπολογισμό της conductance g ενός ημι-μονοδιάστατου συστήματος [Richard (1984), Richard and Andre (1986)].

Χρησιμοποιώντας τους Lyapunov εκθέτες των $N \equiv M^{d-1}$ ιδιοκαταστάσεων, μπορεί να υπολογιστεί η conductance [Kramer and Mackinnon (1993)] από τη σχέση

$$g = \sum_{j=1}^N \frac{2}{\cosh^2(\gamma_j L)}$$

(6.4)

Παρακάτω, υπολογίζουμε την conductance g^{\parallel} και g^{\perp} μέσω της σχέσης (6.4), και χρησιμοποιώντας τους Lyapunov εκθέτες γ_j που πήραμε με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς, με σκοπό να συγκρίνουμε τις τιμές αυτές των g^{\parallel} και g^{\perp} με τις αντίστοιχες του

σχήματος 1(a,b) του παραρτήματος A1. Για να έχει νόημα η σύγκριση, θα πρέπει να χρησιμοποιήσουμε $L=M$ στον τύπο (6.4), γιατί οι υπολογισμοί του 1(a,b) έγιναν σε κυβικό σύστημα $M \times M \times M$. Από τη σχέση (6.4) βλέπουμε ότι το g είναι ένα άθροισμα M^2 όρων, από τους οποίους ο μεγαλύτερος είναι αυτός που αντιστοιχεί στο μικρότερο Lyapunov εκθέτη γ_{min} . Για να δούμε κατά πόσο υπερισχύει αυτός ο όρος στην g , υπολογίσαμε και την conductance g_{min} όπου στο άθροισμα της παραπάνω σχέσης (6.4) κρατήσαμε μόνο τον όρο $\frac{2}{\cosh^2(\gamma_{min} M)}$. Κάποιοι υπολογισμοί των g^{\parallel} και g^{\perp} που έγιναν ενδεικτικά για να δούμε σε ποιες περιοχές τιμών του W τα g_{min} είναι πολύ κοντά στα g δίνονται παρακάτω. Τα αποτελέσματα αυτά, είναι για ανισοτροπία $t=0.1$.

$$W=5.0, \quad \zeta^{\parallel} \simeq 1.5, \quad \zeta^{\perp} \simeq 100$$

M	g^{\parallel}	g_{min}^{\parallel}	g^{\perp}	g_{min}^{\perp}
11	20.19	1.96	4.12×10^{-4}	4.11×10^{-4}
13	22.97	1.97	7.793×10^{-4}	7.787×10^{-4}

$$W=6.0, \quad \zeta^{\parallel} \simeq 3, \quad \zeta^{\perp} \simeq 300$$

M	g^{\parallel}	g_{min}^{\parallel}	g^{\perp}	g_{min}^{\perp}
5	7.54	1.71	4.0×10^{-5}	4.0×10^{-5}

7	9.22	1.78	2.27×10^{-5}	2.26×10^{-5}
9	10.77	1.83	2.22×10^{-5}	2.22×10^{-5}
11	12.25	1.87	3.2×10^{-5}	3.2×10^{-5}

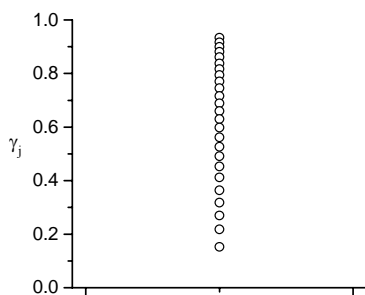
$W=8.0, \quad \xi^{\parallel} \simeq 50, \quad \xi^{\perp} \simeq 20000$

M	g^{\parallel}	g_{min}^{\parallel}	g^{\perp}	g_{min}^{\perp}
5	3.306	1.171	4.25×10^{-6}	4.22×10^{-6}
7	3.56	1.205	7.17×10^{-7}	7.16×10^{-7}
9	3.73	1.22	3.13×10^{-7}	3.12×10^{-7}
11	3.92	1.25	1.81×10^{-7}	1.81×10^{-7}

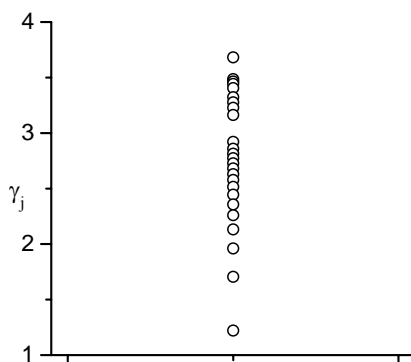
$W=10$

M	g^{\parallel}	g_{min}^{\parallel}	g^{\perp}	g_{min}^{\perp}
5	1.31	0.6085	4.69×10^{-7}	4.65×10^{-7}
7	1.14	0.535	3.3×10^{-8}	3.3×10^{-8}
9	0.976	0.453	4.6×10^{-9}	4.6×10^{-9}
11	0.855	0.412	9.9×10^{-10}	9.9×10^{-10}

Παρατηρούμε ότι στην κάθετη διεύθυνση διάδοσης, τα g_{min}^{\perp} είναι πολύ κοντά με τα g^{\perp} , κι αυτό δείχνει ότι ο ελάχιστος Lyapunov εκθέτης (L.E.) είναι πολύ μικρότερος από τους υπόλοιπους, κι έτσι ο όρος g_{min}^{\perp} κυριαρχεί στην conductance, και ουσιαστικά αρκεί για τον υπολογισμό της g^{\perp} . Αντίθετα, στη διεύθυνση διάδοσης παράλληλα με τα επίπεδα, χρειάζονται και οι επόμενοι όροι για το σωστό υπολογισμό της g^{\parallel} . Η αύξηση των Lyapunov εκθετών, για παράλληλη και κάθετη διεύθυνση, φαίνεται στα σχήματα 6.1 και 6.2 αντίστοιχα.



Σχήμα 6.1: Αύξηση των Lyapunov εκθετων για διαδοση παραλληλα στα επιπεδα για $W=8$, $E=0$, $t=0.1$ και $M=5$.



Σχήμα 6.2: Αύξηση των Lyapunov εκθετων για διαδοση κατατα στα επιπεδα για $W=6$, $E=0$, $t=0.1$ και $M=5$.

Στο σχήμα 6.1 βλέπουμε ενδεικτικά τους εκθέτες Lyapunov για $W=8.0$, $E=0$, $M=5$, ανισοτροπία $t=0.1$, και για διάδοση παράλληλα με τα επίπεδα. Παρατηρούμε ότι ο μικρότερος γ_{min} δεν απέχει πολύ από τον επόμενό του, και γενικά βλέπουμε ότι μειώνεται η απόσταση

μεταξύ γειτονικών Lyapunov εκθετών ομοιόμορφα. Στο σχήμα 6.2 βλέπουμε ενδεικτικά τους L.E. για $W=6.0$, $E=0$, $M=5$, $t=0.1$ και για διάδοση κάθετα στα επίπεδα. Εδώ παρατηρούμε, σε αντίθεση με το σχήμα 6.1, ότι υπάρχουν πυκνώματα και αραιώματα μεταξύ των L.E. καθώς οι L.E. αυξάνονται, και μάλιστα ο ελάχιστος L.E. βρίσκεται σε αραιώμα και πολύ χαμηλότερα από τον αμέσως γειτονικό του. Αυτός είναι ο λόγος που για διάδοση κάθετα στα επίπεδα αρκεί και μόνο ο ελάχιστος L.E. για τον υπολογισμό της g^\perp μέσω της σχέσης (6.4).

Τώρα συγκρίνοντας τα παραπάνω αποτελέσματα για g'' και g^\perp με τα δεδομένα του σχήματος 1(a,b) του παραρτήματος A1, βλέπουμε ότι για τα g^\perp βρίσκουμε συστηματικά μια τάξη μεγέθους λιγότερη, ενώ για τα g'' διαφέρουμε κατά ένα παράγοντα του 2, ιδιαίτερα στις εκτεταμένες καταστάσεις, ενώ όσο πλησιάζουμε το κρίσιμο σημείο και πάμε σε εντοπισμένες καταστάσεις φαίνεται να πλησιάζουν και τα αποτελέσματά μας. Αν σκεφτούμε τις προσεγγίσεις που γίνονται στις τελείως διαφορετικές μεθόδους που χρησιμοποιήθηκαν για να πάρουμε και να συγκρίνουμε αυτά τα g'' και g^\perp , τα παραπάνω δεν θεωρούνται σημαντικές διαφορές στη σύγκριση, και μπορούμε να πούμε ότι η συμφωνία είναι σχετικά καλή.

$$\text{Εξήγηση των σχέσεων } \xi'' = t^2 \xi^\perp \quad \text{και} \quad L_c^\perp = t L_c''$$

Από το σχήμα 2 του παραρτήματος A1 βλέπουμε ότι τα ξ και L_c διαφέρουν σημαντικά στις δύο διαφορετικές διευθύνσεις, και μάλιστα φαίνεται να υπάρχει μια εξάρτηση της μορφής $\xi'' = t^2 \xi^\perp$ και $L_c^\perp = t L_c''$.

Με απλά θεωρητικά επιχειρήματα, θα δείξουμε παρακάτω ότι είναι αναμενόμενη αυτή η συμπεριφορά. Κατ'αρχήν για μικρή αταξία έχουμε εκτεταμένες καταστάσεις, και ισχύει από την υπόθεση κλίμακας ότι $\frac{\lambda_M}{M} = a + \frac{M}{\zeta}$. Επίσης για μικρή αταξία είναι $\frac{M}{\lambda_M} \ll 1$ και μπορούμε να πάρουμε το όριο της σχέσης για την conductance

$$G = 4 \frac{e^2}{h} \left(\frac{1}{e^{2M/\lambda_M} - 1} \right) \simeq 2 \frac{e^2}{h} \frac{\lambda_M}{M}$$

(6.5)

Η conductivity σ συνδέεται με την conductance G μέσω της σχέσης $G = \sigma M^{d-2}$, και για σύστημα τριών διαστάσεων ($d=3$) όπως αυτά που

μελετάμε, είναι $G = \sigma M \Rightarrow \sigma = \frac{G}{M}$ και μέσω της (6.5) έχουμε

$\sigma = 2 \frac{e^2}{h} \frac{\lambda_M}{M^2} = 2 \frac{e^2}{h} \left[\frac{\alpha}{M} + \frac{1}{\zeta} \right]$. Παίρνοντας το όριο $M \rightarrow \infty$, καταλήγουμε ότι

$$\sigma = 2 \frac{e^2}{h} \frac{1}{\zeta}$$

(6.6)

Εφαρμόζοντας τη σχέση (6.6) για την παράλληλη και κάθετη

διεύθυνση, παίρνουμε ότι $\frac{\sigma_{//}}{\sigma_{\perp}} = \frac{\zeta_{\perp}}{\zeta_{//}}$

Στο όριο ασθενούς σκέδασης, η conductivity $\sigma_i (i = x, y, z)$ δίνεται [Economou (1983), Economou and Soukoulis (1983), Economou et al

(1984)] από τη σχέση $\sigma_i = \frac{e^2}{\eta} \frac{1}{4\pi^3} S(E) \langle \frac{v_i^2}{v} \rangle \tau$ όπως εξηγούμε και στην

αναλυτική εργασία του παραρτήματος A2. Παίρνουμε το λόγο

$$\frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{//}} = \frac{\sigma_z}{\sigma_x} = \frac{\langle \frac{v_z^2}{v} \rangle}{\langle \frac{v_x^2}{v} \rangle} \quad \text{ο οποίος ισούται με} \quad \frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{//}} =$$

$t^2 \frac{[Im G(E;000) - Im G(E;002)]}{[Im G(E;000) - Im G(E;200)]}$ και στο όριο $t \rightarrow 0$ γίνεται :

$\frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\parallel}} \approx t^2 \left[\ln 2 + \frac{1}{8} - \frac{1}{4} \ln t \right]$ όπως έχουμε εξηγήσει στο παράρτημα A2.

Έτσι, μπορεί να πει κανείς χονδρικά ότι $\frac{\sigma_{\perp}}{\sigma_{\parallel}} \sim t^2$, κι έτσι μέσω της

(6.7) καταλήγουμε ότι

$$\frac{\xi_{\parallel}}{\xi_{\perp}} \sim t^2$$

(6.8)

το οποίο επιβεβαιώνει τα αριθμητικά μας αποτελέσματα του σχήματος 2 στο A1, για μικρή αταξία $W < W_c$.

Ας κοιτάξουμε τώρα την περίπτωση όπου η αταξία είναι μεγάλη ($W > W_c$) και οι κυματοσυναρτήσεις είναι εντοπισμένες. Το μήκος εντοπισμού σε διεύθυνση παράλληλη προς τα επίπεδα το ονομάζουμε L_c^{\parallel} , ενώ στην κάθετη διεύθυνση L_c^{\perp} . Για ένα σύστημα μήκους L και διατομής A , η σχέση μεταξύ αντίστασης R και ειδικής αντίστασης ρ είναι $R = \rho \frac{L}{A}$ και αντιστρέφοντάς την, μας δίνει μια σχέση μεταξύ conductance $G = \frac{1}{R}$ και conductivity $\sigma = \frac{1}{\rho}$,

$$G = \sigma \frac{A}{L}$$

(6.9)

Εφαρμόζοντας αυτή τη σχέση για το σύστημά μας, μπορούμε να

γράψουμε $G^{\parallel} = \sigma^{\parallel} \frac{L_c^{\parallel} L_c^{\perp}}{L_c^{\parallel}} = \sigma^{\parallel} L_c^{\perp}$ και $G^{\perp} = \sigma^{\perp} \frac{L_c^{\parallel 2}}{L_c^{\perp}}$. Επειδή οι

κυματοσυναρτήσεις είναι εντοπισμένες, το μήκος και η διατομή του συστήματος που μπαίνουν στη σχέση (6.9) για την conductance, καθορίζονται ουσιαστικά από τα μήκη εντοπισμού στις τρεις διευθύνσεις του συστήματος. Γι αυτό και όταν γράφουμε π.χ. την conductance προχωρώντας σε μια διεύθυνση παράλληλη στα επίπεδα, το μήκος του συστήματος που μπορεί ένα ηλεκτρονικό

κύμα να προχωρήσει καθορίζεται από το μήκος εντοπισμού L_c'' , ενώ η διατομή A που μπαίνει στη σχέση (6.9) καθορίζεται από το γινόμενο των μηκών εντοπισμού στις άλλες δύο διευθύνσεις, δηλαδή $A \sim L_c'' L_c^\perp$. Στο κρίσιμο σημείο, θεωρούμε ότι οι G'' και G^\perp είναι ίσες μεταξύ τους, και άρα:

$$\frac{G^\perp}{G''} \sim 1 \Rightarrow \frac{\sigma'' L_c^{\perp 2}}{\sigma'' L_c''^2} \sim 1 \Rightarrow \frac{\sigma''}{\sigma^\perp} \sim \frac{L_c''^2}{L_c^{\perp 2}} \Rightarrow \frac{L_c^\perp}{L_c''} \sim \sqrt{\frac{\sigma^\perp}{\sigma''}} \sim t \Rightarrow \frac{L_c''}{L_c^\perp} \sim \frac{1}{t} \quad (6.10)$$

Η σχέση (6.10) επιβεβαιώνει ποιοτικά τα αριθμητικά μας αποτελέσματα στο σχήμα 2 του Α1, για μεγάλη αταξία $W > W_c$.

Τρόπος υπολογισμού του εκθέτη ν

Ο υπολογισμός του εκθέτη ν για σύστημα συζευγμένων επιπέδων περιγράφεται στο παράρτημα Α2, για διάδοση παράλληλα (ν'') και κάθετα (ν^\perp) στα επίπεδα. Πρέπει να σημειώσουμε ότι ο υπολογισμός του εκθέτη ν δεν είναι εύκολος χρησιμοποιώντας αριθμητικά αποτελέσματα. Αυτό γιατί στον υπολογισμό των αριθμητικών αποτελεσμάτων υπάρχουν σφάλματα, τα οποία καθώς μεταφέρονται στον υπολογισμό του ν δημιουργούν διακυμάνσεις στην τιμή του ν όπως θα δούμε παρακάτω, και αυξάνουν το σφάλμα. Η μέθοδος υπολογισμού του ν είναι αυτή που περιγράφεται στο παράρτημα Α2. Δηλαδή η βασική εξίσωση για τον υπολογισμό είναι η εξίσωση (11) του Α2, η οποία, αν τη λογαριθμίσουμε, γίνεται μια γραμμική σχέση με κλίση $\frac{1}{\nu}$. Χρησιμοποιούμε τα αριθμητικά μας αποτελέσματα για

τον υπολογισμό του $\frac{df}{dW}$ για διάφορες τιμές του M . Ο τρόπος που γίνεται αυτό, είναι ότι για ένα συγκεκριμένο M , παίρνουμε τις τιμές των $\left(\frac{\lambda_M}{M}\right)_{W_1}$ και $\left(\frac{\lambda_M}{M}\right)_{W_2}$ δύο διαφορετικών W_1 και W_2 . Έτσι η παράγωγος είναι :

$$\frac{df}{dW} = \frac{\left(\frac{\lambda_M}{M}\right)_{W_2} - \left(\frac{\lambda_M}{M}\right)_{W_1}}{W_2 - W_1}$$

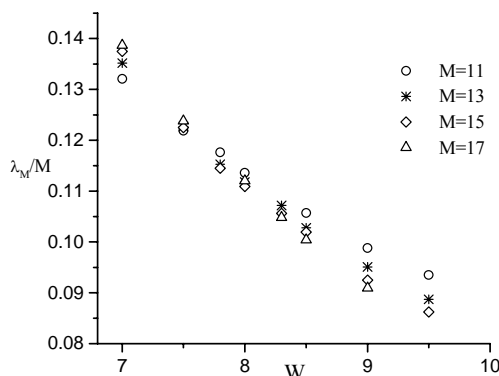
(6.11)

Αυτό επαναλαμβάνεται για διάφορα ζευγάρια τιμών (W_1, W_2) και για διάφορες τιμές του M . Τα (W_1, W_2) είναι κοντά στο κρίσιμο W_c . Όπως βλέπουμε και από τις γραφικές παραστάσεις 6.3 και 6.4, όσο πιο κοντά είμαστε στο κρίσιμο W_c , τόσο πιο μεγάλες διακυμάνσεις υπάρχουν στα αριθμητικά αποτελέσματα, γιατί τα σφάλματα είναι μεγαλύτερα. Αυτές όμως οι διακυμάνσεις δημιουργούν πρόβλημα στον υπολογισμό του ν , γιατί στον υπολογισμό της παραγώγου $\frac{df}{dW}$ μεταφέρουν μεγάλο σφάλμα. Γι' αυτό και πρέπει να παίρνουμε τιμές των W αρκετά μακριά από το W_c , ώστε να μειώνεται το σφάλμα στον υπολογισμό, αλλά και αρκετά κοντά στο W_c , ώστε να υπολογιστεί ο εκθέτης ν κατά τη μετάβαση από το κρίσιμο σημείο που ενδιαφέρει, και όχι πιο μακριά. Επίσης, οι τιμές W_1 και W_2 όταν είναι πολύ κοντά μεταξύ τους, συνήθως έχουμε πρόβλημα με τις διακυμάνσεις όπως θα φανεί με αποτελέσματα που θα δώσουμε παρακάτω, γι' αυτό πρέπει να είναι σχετικά μακριά μεταξύ τους τα W_1 και W_2 , αλλά και αρκετά κοντά ώστε να έχει νόημα ο τρόπος υπολογισμού της παραγώγου $\frac{df}{dW}$.

Υπολογισμός του ν^\perp

Ας κοιτάξουμε πρώτα τον υπολογισμό του ν^\perp . Τα αριθμητικά αποτελέσματα για το $\frac{\lambda_M}{M}$ συναρτήσει του W φαίνονται στο σχήμα

6.3.



Σχήμα 6.3 : Οι τιμές των λ_M/M συναρτήσει του W για $M=11,13,15,17$ και για διαδοχή καθετα στα επίπεδα.

Τα αποτελέσματα αυτά τα πήραμε από αριθμητικούς υπολογισμούς με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς, παίρνοντας μέση τιμή σε 20 διαφορετικά ανεξάρτητα δείγματα, όπως έχουμε εξηγήσει και νωρίτερα στην παράγραφο 6.1.1.2. Στο σχήμα αυτό φαίνονται οι τιμές του $\frac{\lambda_M}{M}$ για διάφορες τιμές του W μεταξύ 7.0 και 9.5, και για $M=11,13,15,17$. Ονομάζουμε α_M την κλίση της ευθείας που ορίζεται από τα $\left(\frac{\lambda_M}{M}\right)$ στις τιμές W_1 και W_2 . Για παράδειγμα, η κλίση α_{11} για

$W_1=7.0$ και $W_2=7.5$, είναι $\alpha_{11} = \frac{\left(\frac{\lambda_{11}}{11}\right)^{w_2} - \left(\frac{\lambda_{11}}{11}\right)^{w_1}}{W_2 - W_1}$ και μας δίνει

ουσιαστικά έναν υπολογισμό του $\frac{df}{dW}$ για $M=11$. Επειδή θέλουμε να

εξετάσουμε τη γραμμική σχέση μεταξύ $\ln \frac{df}{dW}$ και $\ln M$, υπολογίζουμε

το $\frac{df}{dW}$ για διάφορα M , δηλαδή υπολογίζουμε τα α_{11} , α_{13} , α_{15} , α_{17} .

Στη συνέχεια κάνουμε τη γραφική παράσταση του $\ln g_M$ συναρτήσεως

$\ln M$, η οποία πρέπει να είναι γραμμική, και σύμφωνα με αυτά που έχουμε πει και προηγουμένως, η κλίση της ευθείας αυτής θα πρέπει

να είναι ίση με το $\frac{1}{v}$. Έτσι έχουμε έναν υπολογισμό του v

χρησιμοποιώντας μόνο τα αποτελέσματα για W_1 και W_2 . Παρακάτω

δίνουμε τον υπολογισμό του v χρησιμοποιώντας αποτελέσματα

για διάφορα ζευγάρια τιμών W_1 και W_2 . Στον πίνακα 1 δίνονται οι

τιμές των $\frac{\lambda_M}{M}$ για $E=0$ και $t=0.1$ προχωρώντας κάθετα στα επίπεδα.

Πίνακας 1

W	$\frac{\lambda_{11}}{11}$	$\frac{\lambda_{13}}{13}$	$\frac{\lambda_{15}}{15}$	$\frac{\lambda_{17}}{17}$
7.0	0.1321	0.1352	0.1375	0.1387
7.5	0.1219	0.1227	0.1225	0.1238
7.8	0.1176	0.1153	0.1145	—
8.0	0.1136	0.1118	0.1109	0.1120
8.3	—	0.1072	0.1056	0.1048

8.5	0.1057	0.1028	0.1019	0.1004
9.0	0.0988	0.0951	0.0925	0.0909
9.5	0.0935	0.0887	0.0862	–

Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω δεδομένα, δίνουμε τις κλίσεις α_M και τον υπολογισμό του ν^\perp στον πίνακα 2.

Πίνακας 2

W_1	W_2	α_{11}	α_{13}	α_{15}	α_{17}	ν^\perp
7.0	7.5	2.04 $\times 10^{-3}$	2.50 $\times 10^{-3}$	3.00 $\times 10^{-3}$	2.98 $\times 10^{-3}$	1.08
7.5	8.0	1.66 $\times 10^{-3}$	2.18 $\times 10^{-3}$	2.32 $\times 10^{-3}$	2.36 $\times 10^{-3}$	1.27
7.5	8.5	1.62 $\times 10^{-3}$	1.99 $\times 10^{-3}$	2.06 $\times 10^{-3}$	2.34 $\times 10^{-3}$	1.26
7.5	8.3	–	1.94 $\times 10^{-3}$	2.11 $\times 10^{-3}$	2.38 $\times 10^{-3}$	1.32
8.0	8.5	1.58 $\times 10^{-3}$	1.80 $\times 10^{-3}$	1.80 $\times 10^{-3}$	2.32 $\times 10^{-3}$	1.28
8.3	8.5	–	2,2 $\times 10^{-3}$	1.85 $\times 10^{-3}$	2.2 $\times 10^{-3}$?

8.3	9.0	–	1.73 $\times 10^{-3}$	1.87 $\times 10^{-3}$	1.99 $\times 10^{-3}$	1.93
8.0	8.3	–	1.53 $\times 10^{-3}$	1.77 $\times 10^{-3}$	2.4 $\times 10^{-3}$	0.61
8.5	9.0	1.38 $\times 10^{-3}$	1.54 $\times 10^{-3}$	1.88 $\times 10^{-3}$	1.90 $\times 10^{-3}$	1.24
7.5	7.8	1.43 $\times 10^{-3}$	2.47 $\times 10^{-3}$	2.67 $\times 10^{-3}$	–	0.5
7.8	8.5	1.7 $\times 10^{-3}$	1.79 $\times 10^{-3}$	1.8 $\times 10^{-3}$	–	5.35

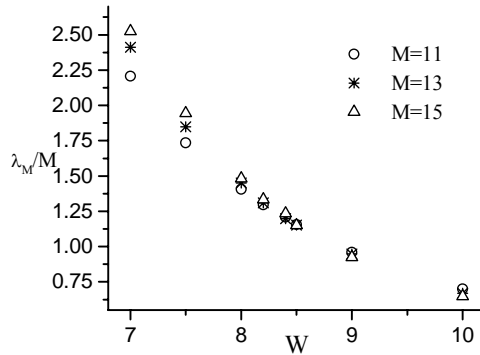
Από τον πίνακα 2 βλέπουμε ότι όσες τιμές του ν υπολογίστηκαν χρησιμοποιώντας το $W=7.8$ και το $W=8.3$, διαφέρουν σημαντικά από τις υπόλοιπες, εμφανίζοντας μεγάλες διακυμάνσεις. Ειδικότερα στην περίπτωση $W_1=8.3$, $W_2=8.5$, δε μπορεί να υπολογιστεί το ν μια και όπως βλέπουμε η εξάρτηση του $\ln \alpha_M$ από το $\ln M$ δεν φαίνεται γραμμική. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι οι τιμές $\frac{\lambda_M}{M}$ για $W=7.8$ δεν είναι εντελώς ακριβής, και, όπως έχουμε αναφέρει ξανά, διακυμάνσεις των δεδομένων όχι μεγάλες δημιουργούν αρκετό σφάλμα στον υπολογισμό του ν , με τον τρόπο που το υπολογίζουμε. Κάτι παρόμοιο βλέπουμε να συμβαίνει και για τα δεδομένα του $W=8.3$. Γι' αυτό, όταν πάρουμε μέση τιμή και διασπορά μέσης τιμής των ν του πίνακα 2, θα παραλείψουμε τις τιμές του ν που προκύπτουν χρησιμοποιώντας το $W=7.8$ ή το $W=8.3$. Επίσης, δεν λαμβάνουμε υπόψη τον υπολογισμό του ν όταν $W_1=7.0$ και $W_2=7.5$, γιατί αυτές οι τιμές του W είναι αρκετά μακριά από το κρίσιμο σημείο $W_c \sim 8.5$, ενώ εμείς ενδιαφερόμαστε για

τον εκθέτη ν στο κρίσιμο σημείο $W_c \sim 8.5$. Έτσι, από τα υπόλοιπα ν , η μέση τιμή που παίρνουμε είναι 1.26 με διασπορά μέσης τιμής 0.01. Άρα από τα παραπάνω καταλήγουμε ότι ο εκθέτης ν^\perp στο κρίσιμο σημείο προχωρώντας κάθετα στα επίπεδα είναι $\nu^\perp = 1.3 \pm 0.1$. Παρατηρούμε ότι η διασπορά μέσης τιμής του ν^\perp δεν είναι μεγάλη. Ο λόγος είναι γιατί χρησιμοποιήσαμε και δεδομένα για $M=17$, που είναι η μεγαλύτερη τιμή του M για την οποία μπορούμε να έχουμε δεδομένα. Έτσι ο υπολογισμός του ν^\perp είναι περισσότερο ακριβής απ' ό,τι αν δεν λαμβάναμε υπόψη τα $M=17$. Αυτό μπορούμε να το δούμε καθαρά από τα δεδομένα του πίνακα 2, όπου παραλείποντας τα α_{17} οι τιμές των ν που θα πάρουμε θα είναι πολύ διαφορετικές. Για παράδειγμα, όταν είναι $W_1=7.5$ και $W_2=8.0$, παραλείποντας το α_{17} η τιμή του ν που παίρνουμε είναι 0.91, η οποία είναι αρκετά μακριά από τη μέση τιμή 1.26.

Υπολογισμός του ν''

Ας κοιτάξουμε τώρα τον υπολογισμό του ν'' , όπου ν'' είναι ο εκθέτης ν όταν η διάδοση γίνεται παράλληλα στα επίπεδα. Τα αριθμητικά αποτελέσματα για το $\frac{\lambda_M}{M}$ συναρτήσει του W φαίνονται στο σχήμα 6.4. Τα αποτελέσματα αυτά τα πήραμε με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς και παίρνοντας μέση τιμή από 20 διαφορετικά δείγματα, όπως είχαμε εξηγήσει και προηγουμένως. Στο σχήμα 6.4 φαίνονται δεδομένα μεταξύ $W=7.0$ και $W=10$, ενώ το M παίρνει τιμές $M=11, 13, 15$. Εδώ δεν προχωρήσαμε τους υπολογισμούς μας σε $M=17$, γιατί το $M=15$ ήταν αρκετά μεγάλο για το σωστό

προσδιορισμό του κρίσιμου σημείου μετάβασης μετάλλου-μονωτή, όπως βλέπουμε και από το σχήμα 1c του παραρτήματος A1.



Σχήμα 6.3: Οι τιμές των λ_M/M συναρτήσει του W για $M=11,13,15$ και για διάδοση παράλληλα στα επίπεδα.

Ο υπολογισμός του εκθέτη ν'' γίνεται με τον τρόπο που περιγράψαμε για τον υπολογισμό του ν^\perp . Στον πίνακα 3 δίνονται τα αριθμητικά αποτελέσματα $\frac{\lambda_M}{M}$ του σχήματος 6.4, για διάδοση παράλληλα στα επίπεδα σε ενέργεια $E=0$ και ανισοτροπία $t=0.1$.

Πίνακας 3

W	$\frac{\lambda_{11}}{11}$	$\frac{\lambda_{13}}{13}$	$\frac{\lambda_{15}}{15}$
7.0	2.207	2.411	2.525
7.5	1.735	1.849	1.944
8.0	1.405	1.451	1.481
8.2	1.297	1.310	1.333
8.4	1.209	1.198	1.235
8.5	1.157	1.152	1.151

9.0	0.959	0.948	0.925
10	0.7004	0.6689	0.6466

Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω δεδομένα, δίνουμε τις κλίσεις α_M και τον υπολογισμό του ν'' στον πίνακα 4.

Πίνακας 4

W_1	W_2	α_{11}	α_{13}	α_{15}	ν''
7.5	8.5	0.578	0.697	0.793	0.98
8.2	9.0	0.423	0.453	0.510	1.66
8.2	8.5	0.467	0.527	0.607	1.19
8.5	9.0	0.396	0.408	0.452	2.39
8.0	8.5	0.496	0.598	0.660	1.08
8.0	8.2	0.540	0.705	0.740	0.97
8.0	8.0	0.660	0.796	0.926	0.92

Η μέση τιμή των τιμών του ν'' βγαίνει ίση με 1.31, ενώ η διασπορά μέσης τιμής 0.21. Έτσι μπορούμε να πούμε ότι είναι $\nu'' \approx 1.3 \pm 0.2$. Εδώ υπάρχουν μεγαλύτερες διακυμάνσεις γύρω από τη μέση τιμή του ν'' απ'ότι στον υπολογισμό του ν^\perp , και πιστεύουμε ότι αυτό συμβαίνει ίσως λόγω του $M=17$ που δεν λάβαμε υπόψη στον υπολογισμό του ν'' .

Υπολογισμός του ν'' (με $L=100000$ και $M=11,13,15$)

Για διάδοση παράλληλα στα επίπεδα, ανισοτροπία $t=0.1$ και σε ενέργεια $E=0$, κάναμε αριθμητικούς υπολογισμούς με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς σε σύστημα συγκεκριμένου μήκους 100000 και έχοντας μόνο ένα 'δείγμα' κάθε φορά (δηλαδή χωρίς να παίρνουμε μέση τιμή του γ_{min} από 20 διαφορετικά 'δείγματα' όπως κάναμε για τους υπολογισμούς της προηγούμενης παραγράφου). Τα αριθμητικά αυτά αποτελέσματα δίνονται στον πίνακα 5, ενώ στον πίνακα 6 φαίνεται ο υπολογισμός του ν'' χρησιμοποιώντας αυτά τα αποτελέσματα.

Πίνακας 5

W	$\frac{\lambda_{11}}{11}$	$\frac{\lambda_{13}}{13}$	$\frac{\lambda_{15}}{15}$
7.0	2.193	2.382	2.574
7.5	1.767	1.872	1.946
8.0	1.405	1.447	1.505
8.2	1.304	1.317	1.313

8.4	1.176	1.215	1.198
8.5	1.155	1.174	1.144
8.8	1.029	1.0416	1.029
9.0	0.947	0.960	0.939
9.5	0.8045	0.794	0.7716
10.0	0.701	0.660	0.6414

Πίνακας 6

W_1	W_2	α_{11}	α_{13}	α_{15}	ν''
8.0	8.5	0.500	0.546	0.722	0.85
8.0	8.2	0.505	0.650	0.960	0.49
7.0	7.5	0.852	1.02	1.256	0.80
7.5	8.0	0.724	0.850	0.882	1.55
7.0	8.0	0.788	0.935	1.069	1.02
9.5	10.0	0.206	0.267	0.260	1.29
8.0	8.4	0.573	0.580	0.768	1.09
8.8	9.5	0.321	0.354	0.368	2.2

Όταν πήραμε $W_1=8.0$ και $W_2=8.2$, το αποτέλεσμα για το v'' δεν ήταν καθόλου καλό, πιθανώς γιατί τα W_1 και W_2 είναι πολύ κοντά μεταξύ τους. Τα σφάλματα που υπάρχουν στον υπολογισμό των W_1 και W_2 μεταφέρουν μεγάλο σφάλμα στον υπολογισμό των κλίσεων α_{11} , α_{13} , α_{15} ιδιαίτερα όταν τα W_1 , W_2 είναι πολύ κοντά μεταξύ τους. Γι' αυτό και όταν πάρουμε μέση τιμή του v'' θα παραλείψουμε την τιμή 0.49. Από τις υπόλοιπες τιμές του v'' παίρνουμε μέση τιμή 1.26 και διασπορά μέσης τιμής 0.19. Έτσι και από αυτό τον υπολογισμό μπορούμε να πούμε ότι είναι $v'' \approx 1.3 \pm 0.2$, σε συμφωνία με τον υπολογισμό της προηγούμενης παραγράφου όπου είχαμε ξεκινήσει από αριθμητικά δεδομένα που τα πήραμε σαν μέση τιμή 20 διαφορετικών δειγμάτων μήκους $L \geq 5000$.

Υπολογισμός του v'' (με $L=100000$ και $M=9, 11, 13$)

Για να δείξουμε πόσο σημαντικό είναι να έχουμε πάρει αριθμητικά δεδομένα από αρκετά μεγάλο σύστημα (όσον αφορά τη διάσταση M), παρακάτω δείχνουμε μια προσπάθεια υπολογισμού του v'' , χρησιμοποιώντας δεδομένα για $M=9, 11, 13$. Τα αποτελέσματα αυτά είναι ξανά για ανισοτροπία $t=0.1$, ενέργεια $E=0$ και ένα 'δείγμα' κάθε φορά μήκους 100000. Δηλαδή η μόνη διαφορά από την προηγούμενη παράγραφο είναι ότι παίρνουμε $M=9, 11, 13$ αντί για $M=11, 13, 15$

Στον πίνακα 7 φαίνονται μερικά αριθμητικά δεδομένα τα οποία θα χρησιμοποιήσουμε, και στον πίνακα 8 φαίνεται το αποτέλεσμα αυτής της προσπάθειας.

Πίνακας 7

W	$\frac{\lambda_9}{9}$	$\frac{\lambda_{11}}{11}$	$\frac{\lambda_{13}}{13}$
7.0	2.019	2.193	2.382
7.5	1.636	1.767	1.872
8.0	1.380	1.405	1.447
8.2	1.264	1.304	1.317
8.4	1.165	1.176	1.215
8.5	1.133	1.155	1.174

Πίνακας 8

W_1	W_2	α_9	α_{11}	α_{13}	ν''
7.5	8.0	0.512	0.724	0.850	0.72

8.0	8.2	0.580	0.505	0.650	?
8.0	8.4	0.5375	0.5725	0.580	4.76
8.0	8.5	0.494	0.500	0.546	3.77

Στην περίπτωση όπου $W_1=8.0$ και $W_2=8.2$ τα α_M δεν αυξάνονται μονότονα, και δεν μπορούμε να υπολογίσουμε το v'' . Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα για το v'' είναι πολύ άσχημα, και απέχουν πολύ από την τιμή 1.3 ± 0.2 που υπολογίσαμε προηγουμένως με περισσότερη ακρίβεια. Πιστεύουμε ότι αν είχαμε αποτελέσματα και για το $M=17$, το σφάλμα στον υπολογισμό του v'' όπως υπολογίστηκε από τους πίνακες 4 και 6 θα ήταν ακόμη μικρότερο.

Υπολογισμός της β -συνάρτησης

Στις παραγράφους 3.2 και 4.1 μιλήσαμε για τον ορισμό της β -συνάρτησης, σχέση (4.5), και τη συμπεριφορά της σε εκτεταμένες και εντοπισμένες καταστάσεις. Για τρισδιάστατο σύστημα (όπως είναι αυτά που μελετάμε), η β -συνάρτηση μπορεί να γραφεί [Mackinnon and Kramer (1981)] ως εξής:

$$\beta(g) = \beta_l(g) \frac{d \ln f(x)}{d \ln x}$$

(6.12)

όπου $x = \frac{\lambda_{\infty}(W)}{M}$, $f(x) = \frac{\lambda_M}{M}$ και $\beta_1(g)$ είναι η β -συνάρτηση στην περίπτωση όπου $d=1$. Η β_1 -συνάρτηση γράφεται [Mackinnon and Kramer (1983a)]:

$$\beta_1(g) = (1 + \pi g) \ln \left(\frac{\pi g}{1 + \pi g} \right)$$

(6.13)

όπου $g = \frac{I}{\pi} \left(\frac{T}{1-T} \right)$ έχοντας ορίσει $T = e^{\frac{-2M}{\lambda_M}}$. Χρησιμοποιώντας τα

αριθμητικά μας αποτελέσματα για τα $\frac{\lambda_M}{M}$ και τα $\frac{\lambda_{\infty}(W)}{M}$,

υπολογίζουμε τη β -συνάρτηση μέσω των προηγούμενων σχέσεων, για το ανισότροπο μοντέλο που μελετάμε ανισοτροπίας $t=0.1$ και για διάδοση παράλληλα και κάθετα στα επίπεδα. Επειδή τα αποτελέσματά μας είναι αριθμητικά, έχουμε μόνο ορισμένες τιμές για τα x και $f(x)$, τις οποίες θα χρησιμοποιήσουμε στη σχέση (6.12) για τον υπολογισμό της β -συνάρτησης. Για τα συγκεκριμένα x και $f(x)$ υπολογίζουμε τα $\ln x$ και $\ln f(x)$, και στη συνέχεια την παράγωγο

$\frac{d \ln f(x)}{d \ln x}$ την προσεγγίζουμε με $\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$, όπου τα $\Delta(\ln f(x))$ και

$\Delta(\ln x)$ είναι η διαφορά μεταξύ δύο γειτονικών $\ln f(x)$ και $\ln x$

αντίστοιχα. Έτσι η παράγωγος αυτή υπολογίζεται σε μια θέση

$(\bar{x}, \bar{f}(x))$ όπου είναι μεταξύ των γειτονικών $(x_1, f(x_1))$ και $(x_2, f(x_2))$. Στη

θέση αυτή, δηλαδή την $(\bar{x}, \bar{f}(x))$, πρέπει να υπολογιστεί και η $\beta_1(g)$

για να είναι σωστός ο υπολογισμός της $\beta(g)$. Για τους

υπολογισμούς μας, τα \bar{x} και $\bar{f}(x)$ τα παίρνουμε σαν το μέσο όρο των

x_1, x_2 και $f(x_1), f(x_2)$ αντίστοιχα.

Καταρχήν υπολογίζουμε τη β -συνάρτηση για ανισοτροπία $t=0.1$, σε ενέργεια $E=0$, και για διάδοση παράλληλα στα επίπεδα. Στους πίνακες 9α και 9β φαίνονται τα δεδομένα για εκτεταμένες καταστάσεις, ενώ στους 10α και 10β για εντοπισμένες καταστάσεις. Στον πίνακα 9α είναι $x \equiv \frac{\xi}{M}$ και $f(x) = \frac{\lambda_M}{M}$, ενώ φαίνεται και ο υπολογισμός των $\Delta(\ln x)$ και $\Delta(\ln f(x))$ μεταξύ γειτονικών $\ln x$ και $\ln f(x)$.

Πίνακας 9α

$x = \xi/M$	$\ln x$	$\Delta \ln x$	$f(x)$	$\ln f(x)$	$\Delta \ln f$
0.1007	-2.296		9.950	2.298	
		0.144			-0.174
0.1162	-2.152		8.361	2.124	
		0.166			-0.164
0.1373	-1.986		7.102	1.960	
		0.516			-0.391

0.2299	-1.470		4.80	1.569	
		0.143			-0.134
0.2653	-1.327		4.20	1.435	
		0.167			-0.095
0.3135	-1.160		3.82	1.340	
		0.158			-0.085
0.367	-1.002		3.509	1.255	
		0.1416			-0.090
0.423	-0.8604		3.205	1.165	
		0.1673			-0.102
0.500	-0.6931		2.895	1.063	
		0.3264			-0.1368
0.693	-0.3667		2.525	0.9262	
		0.1436			-0.0462
0.800	-0.2231		2.411	0.880	
		0.1665			-0.0884
0.945	-0.0566		2.207	0.7916	
		0.301			-0.127

1.277	0.2445		1.944	0.6647	
		0.1435			-0.0501
1.474	0.3880		1.849	0.6146	
		0.167			-0.0636
1.742	0.5550		1.735	0.5510	
		0.700			-0.1583
3.509	1.2553		1.481	0.3927	
		0.143			-0.0204
4.048	1.3982		1.451	0.3723	
		0.1673			-0.0323
4.785	1.5655		1.405	0.3400	

Πίνακας 9β

\bar{x}	$\bar{f}(x)$	T	πg	$\beta_i(g)$	$\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$	β
0.108	9.15	0.80	4.10	-	-1.208	1.34
		4	2	1.113		5

0.127	7.73	0.77	3.38	-	-0.988	1.12
		2	6	1.135		1
0.184	6.04	0.71	2.54	-	-0.758	0.89
	1	8	8	1.175		0
0.248	4.59	0.64	1.83	-	-0.937	1.11
		7	1	1.233		5
0.289	4.01	0.60	1.54	-	-0.569	0.72
		7	6	1.270		2
0.340	3.66	0.57	1.37	-	-0.538	0.69
		9	5	1.298		8
0.395	3.35	0.55	1.22	-	-0.636	0.84
	7	1	8	1.328		5
0.462	3.05	0.51	1.07	-	-0.610	0.83
		9	9	1.364		2
0.597	2.71	0.47	0.91	-	-0.419	0.59
		8	6	1.414		3
0.747	2.47	0.44	0.80	-	-0.322	0.47
		5	2	1.459		0
0.873	2.31	0.42	0.72	-	-0.531	0.79
		1	6	1.493		3
1.111	2.07	0.38	0.61	-	-0.422	0.65
	5	1	6	1.559		8
1.376	1.90	0.34	0.53	-	-0.349	0.56

		9	6	1.617		4
1.608	1.79	0.32	0.48	-	-0.381	0.63
	2	8	7	1.658		2
2.626	1.60	0.28	0.40	-	-0.226	0.39
	8	8	5	1.749		5
3.779	1.46	0.25	0.34	-	-0.143	0.26
	6	6	3	1.830		2
4.417	1.42	0.24	0.32	-	-0.193	0.35
	8	6	7	1.861		9

Στους πίνακες 10α και 10β φαίνονται τα δεδομένα για εντοπισμένες καταστάσεις, και το x ορίζεται σαν $x \equiv \frac{L_c}{M}$.

Πίνακας 10α

x	$\ln x$	$\Delta \ln x$	$f(x)$	$\ln f(x)$	$\Delta \ln f(x)$
0.741	-0.300		0.375	-0.9808	
		0.143			0.062
0.855	-0.157		0.399	-0.9188	
		0.167			0.0818
1.010	0.0099		0.433	-0.8370	
	5				

		0.810		0.432
2.27	0.820		0.667	-0.4050
		0.141		-0.032
2.615	0.961		0.646	-0.4370
		0.167		0.0803
3.09	1.128		0.700	-0.3567
		0.794		0.2787
6.838	1.922		0.925	-0.0780
		0.144		0.0246
7.890	2.066		0.948	-0.0534
		0.167		0.0115
9.324	2.233		0.959	-0.0419
		1.967		0.1825
66.67	4.200		1.151	0.1406
		0.143		9×10^{-4}
76.92	4.343		1.152	0.1415
		0.167		4.3×10^{-3}

90.91 4.510 1.157 0.1458

Πίνακας 10β

\bar{x}	$\bar{f}(x)$	$\beta_1(g)$	$\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$	β
0.798	0.387	-5.197	0.4336	-2.253
0.933	0.416	-4.847	0.490	-2.375
1.640	0.550	-3.735	0.533	-1.991
2.443	0.657	-3.196	-0.227	0.725
2.853	0.673	-3.132	0.481	-1.506
4.964	0.813	-2.690	0.351	-0.944
7.364	0.937	-2.421	0.1708	-0.414
8.607	0.954	-2.390	0.0691	-0.165
38.0	1.055	-2.231	0.0928	-0.207
72.0	1.152	-2.107	0.00629	-0.01325
83.92	1.155	-2.104	0.0257	-0.0541

Παρακάτω υπολογίζουμε τη β -συνάρτηση για διάδοση κάθετα στα επίπεδα (με ανισοτροπία $t=0.1$ και σε ενέργεια $E=0$). Στους πίνακες 11α και 11β φαίνονται τα αποτελέσματα για εκτεταμένες

καταστάσεις, ενώ στους πίνακες 12α και 12β για εντοπισμένες καταστάσεις.

Πίνακας 11α

x	$\Delta \ln x$	$f(x)$	$\Delta \ln f(x)$
0.267		3.33	
	0.1425		-0.263
0.308		2.56	
	0.1670		-0.342
0.364		1.818	
	0.0540		-0.097
0.384		1.65	
8.71		0.2331	
	0.144		-0.0637
10.06		0.2187	
	0.166		-0.077
11.88		0.2025	
	0.501		-0.149

19.61		0.1745	
	0.143		-0.043
22.62		0.1672	
	0.167		-0.038
26.74		0.1609	
	0.354		-0.046
38.10		0.1536	
	0.143		-0.032
43.96		0.1488	
	0.167		-0.015
51.95		0.1466	
	0.345		-0.064
73.33		0.1375	
	0.143		-0.017
84.62		0.1352	
	0.167		-0.023
100.0		0.1321	
	1.492		-0.076

444.44	0.1225
0.143	0.002
512.82	0.1227
0.167	-0.007
606.06	0.1219

Πίνακας 11β

\bar{x}	$\bar{f}(x)$	$\beta_i(g)$	$\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$	β
0.2875	2.945	-1.378	-1.846	2.543
0.336	2.189	-1.525	-2.048	3.123
0.374	1.734	-1.685	-1.796	3.027
9.385	0.2259	-8.855	-0.442	3.917
10.97	0.2106	-9.497	-0.464	4.405
15.75	0.1885	-10.61	-0.297	3.155
21.12	0.1709	-11.70	-0.301	3.518
24.68	0.1641	-12.19	-0.228	2.774
32.42	0.1573	-12.71	-0.130	1.652

41.03	0.1512	-13.23	-0.224	2.961
47.96	0.1477	-13.54	-0.0898	1.216
62.64	0.1421	-14.07	-0.186	2.610
78.98	0.1364	-14.66	-0.119	1.743
92.31	0.1337	-14.96	-0.138	2.060
272.2	0.1273	-15.71	-0.051	0.800
478.63	0.1226	-16.31	0.0140	-0.228
559.4	0.1223	-16.35	-0.0419	0.685

Πίνακας 12α

x	$\Delta \ln x$	$f(x)$	$\Delta \ln f(x)$
0.154		0.07025	
	0.145		0.053
0.178		0.07404	
	0.165		0.062
0.210		0.07878	
	0.024		0.004

0.2151		0.07908	
	0.143		0.050
0.2481		0.08315	
	0.167		0.053
0.2933		0.08767	
	0.141		0.012
0.3374		0.0887	
	0.166		0.052
0.3987		0.0935	
	0.098		0.017
0.4396		0.0951	
	0.167		0.038
0.5195		0.0988	
	0.144		0.031
0.60		0.1019	
	0.140		0.009
0.69		0.1028	
	0.170		0.028

0.818		0.1057	
	0.415		0.048
1.239		0.1109	
	0.1434		0.008
1.430		0.1118	
	0.167		0.016
1.690		0.1136	
	0.1328		0.008
1.93		0.1145	
	0.1445		0.007
2.23		0.1153	
	0.1688		0.02
2.64		0.1176	

Πίνακας 12β

\bar{x}	$\bar{f}(x)$	$\beta_1(g)$	$\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$	β
0.166	0.0721	-27.72	0.3655	-10.13

0.194	0.0764	-26.17	0.3758	-9.834
0.213	0.0789	-25.34	0.1667	-4.223
0.2316	0.0811	-24.65	0.3497	-8.619
0.2707	0.0854	-23.42	0.3174	-7.433
0.3154	0.0882	-22.68	0.0851	-1.930
0.3681	0.0911	-21.95	0.3133	-6.876
0.4192	0.0943	-21.21	0.1735	-3.679
0.4796	0.0970	-20.62	0.2275	-4.692
0.5598	0.1004	-19.92	0.2153	-4.288
0.6450	0.1024	-19.53	0.0643	-1.256
0.7540	0.1043	-19.18	0.1647	-3.159
1.029	0.1083	-18.47	0.1157	-2.136
1.335	0.1114	-17.95	0.0558	-1.001
1.560	0.1127	-17.75	0.0958	-1.701
1.810	0.1141	-17.53	0.0602	-1.056
2.080	0.1149	-17.41	0.0484	-0.8434
2.435	0.1165	-17.17	0.1185	-2.034

Στην περιοχή εκτεταμένων καταστάσεων, παρατηρούμε από τον πίνακα 11α ότι δεν έχουμε αρκετά αριθμητικά αποτελέσματα, ειδικά στην περιοχή $0.5 < x < 7.0$. Έτσι, από την καμπύλη του $\frac{\lambda_M}{M}$ συναρτήσει του $\frac{\xi}{M}$ που έχει σχηματιστεί χρησιμοποιώντας τα ήδη γνωστά αριθμητικά μας αποτελέσματα, διαβάζουμε (κατά προσέγγιση) τιμές για τα x και $f(x)$, και τα γράφουμε στον πίνακα 13α. Στη συνέχεια από τα δεδομένα αυτά, στους πίνακες 13α και 13β υπολογίζουμε τη β -συνάρτηση.

Πίνακας 13α

x	$\Delta \ln x$	$f(x)$	$\Delta \ln f(x)$
0.5		1.2	
	0.1822		-0.1823
0.6		1.0	
	0.1541		-0.1278
0.7		0.88	
	0.1336		-0.1079
0.8		0.79	
	0.1177		-0.0928
0.9		0.72	

	0.1054		-0.072
1.0		0.67	
	0.4055		-0.2534
1.5		0.52	
	0.2876		-0.1446
2.0		0.45	
	0.2232		-0.0931
2.5		0.41	
	0.1827		-0.1027
3.0		0.37	
	0.154		-0.0847
3.5		0.34	
	0.133		-0.06
4.0		0.32	
	0.118		-0.048
4.5		0.305	
	0.105		-0.051
5.0		0.29	

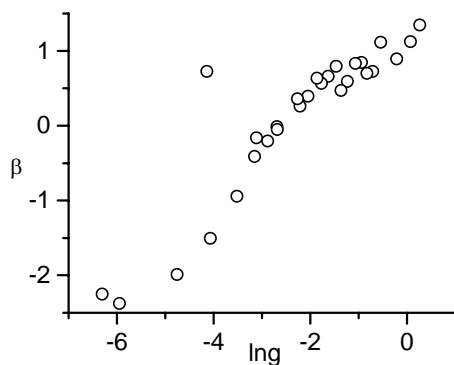
	0.183	-0.071
6.0		0.27
	0.154	-0.077
7.0		0.25

Πίνακας 13β

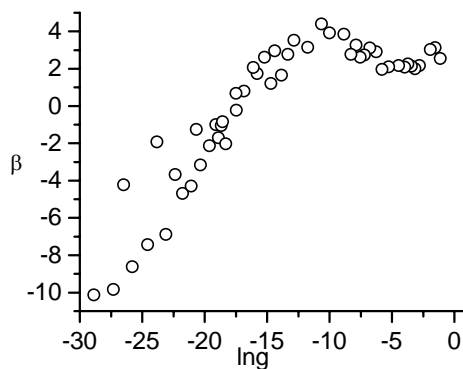
\bar{x}	$\bar{f}(x)$	$\beta_1(g)$	$\frac{\Delta(\ln f(x))}{\Delta(\ln x)}$	β
0.55	1.1	-2.170	-1.0005	2.171
0.65	0.94	-2.415	-0.829	2.003
0.75	0.835	-2.635	-0.8076	2.128
0.85	0.755	-2.851	-0.7884	2.248
0.95	0.695	-3.049	-0.6831	2.083
1.25	0.595	-3.482	-0.6249	2.176
1.75	0.485	-4.192	-0.5028	2.108
2.25	0.430	-4.696	-0.4171	1.959
2.75	0.39	-5.159	-0.5621	2.900
3.25	0.355	-5.654	-0.550	3.110

3.75	0.33	-6.075	-0.451	2.741
4.25	0.3125	-6.411	-0.4068	2.608
4.75	0.2975	-6.731	-0.4857	3.269
5.5	0.28	-7.149	-0.388	2.774
6.5	0.26	-7.696	-0.500	3.848

Η γραφική παράσταση της $\beta(g)$ συναρτήσεως $\ln g$, φαίνεται στα σχήματα 6.5 και 6.6 για διάδοση παράλληλα και κάθετα στα επίπεδα αντίστοιχα.



Σχήμα 6.5: Η συνάρτηση $\beta(g)$ για διάδοση παράλληλα στα επίπεδα και ανισοτροπία $t=0.1$.



Σχήμα 6.6: Η συνάρτηση $\beta(g)$ για διάδοση κάθετα στα επίπεδα και ανισοτροπία $t=0.1$.

Το σχήμα 6.6 συμπεριλαμβάνει και τα αποτελέσματα από τον πίνακα 13β. Και στα δύο σχήματα παρατηρούμε ότι υπάρχει μεγάλη διασπορά στα σημεία, κάτι που δικαιολογείται αν θυμηθούμε ότι καταρχήν ξεκινήσαμε από αριθμητικά αποτελέσματα, και κατά δεύτερον τις προσεγγίσεις που κάναμε στη συνέχεια, με την παράγωγο που την προσεγγίσαμε με διαφορά γειτονικών τιμών, και τις τιμές $\bar{f}(x)$ που τις προσεγγίσαμε με τη μέση τιμή γειτονικών $f(x)$. Το σημαντικό όμως είναι ότι η γενική συμπεριφορά της β -συνάρτησης, και στις δύο περιπτώσεις, είναι η αναμενόμενη.

Αναλυτική εργασία

Όπως έχουμε αναφέρει στην παράγραφο 5.2, υπάρχει σύνδεση του προβλήματος του εντοπισμού με το πρόβλημα μιας δέσμιας κατάστασης σε πηγάδι δυναμικού, και σε συνδυασμό με την CPA μπορεί να μελετηθεί η κρίσιμη συμπεριφορά του W_c συναρτήσει της ανισοτροπίας t ενός συστήματος. Στην παράγραφο V του παραρτήματος A2, αναπτύσσουμε αυτή την αναλυτική εργασία για τη μελέτη της συμπεριφοράς της κρίσιμης αταξίας W_c συναρτήσει της ανισοτροπίας t για ασθενώς συζευγμένα επίπεδα ή αλυσίδες. Καταρχήν καταλήγουμε σε ένα γενικό κριτήριο εντοπισμού (την εξίσωση (19) του παραρτήματος A2), και στη συνέχεια εφαρμόζοντάς το για σύζευξη επιπέδων ή σύζευξη αλυσίδων, παίρνουμε εκφράσεις για τον κρίσιμο χρόνο εφησυχασμού τ_c (την εξίσωση (27) ή (37) του A2, για σύζευξη επιπέδων ή αλυσίδων, αντίστοιχα). Η γραφική παράσταση του τ_c συναρτήσει της ανισοτροπίας t φαίνεται στο σχήμα 8 του A2, για σύζευξη επιπέδων (a) και αλυσίδων (b).

Από τις σχέσεις (27) και (37) του Α2, βλέπουμε ότι το τ_c εξαρτάται από το λόγο $\frac{S(E)}{C_1}$, όπου $S(E)$ είναι η επιφάνεια Fermi και C_1 μια σταθερά. Για $t=1$ (που αντιστοιχεί σε τρισδιάστατο ισότροπο σύστημα), ξέρουμε την τιμή του λόγου $\frac{S(E=0)}{C_1}=6.75$. Για $t=0$, το σύστημα αντιστοιχεί σε επίπεδα, οπότε είναι $\frac{S(E=0)}{C_1}=7.70$, ή αλυσίδες όπου $\frac{S(E=0)}{C_1}=\frac{1}{\pi}$. Για $0<t<1$ δεν γνωρίζουμε την ακριβή τιμή του $\frac{S(E=0)}{C_1}$, γι'αυτό παίρνουμε μια γραμμική προσέγγιση του $\frac{S}{C_1}$, μεταξύ της τιμής για $t=1$ και $t=0$. Έτσι, στη σύζευξη επιπέδων χρησιμοποιήσαμε $\frac{S(E=0)}{C_1}=6.75 (t+1.141(1-t))$, ενώ στη σύζευξη αλυσίδων, $\frac{S(E=0)}{C_1}=6.75 (t+\frac{1}{6.75\pi} (1-t))$.

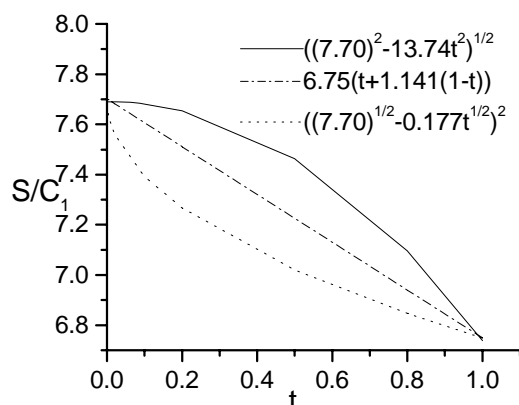
Για να δούμε αν αλλάζουν σημαντικά τα αποτελέσματα παίρνοντας μια άλλη προσέγγιση και όχι γραμμική, κάναμε λίγους υπολογισμούς ενδεικτικά για σύζευξη επιπέδων, με τις παρακάτω δύο προσεγγίσεις:

$$\alpha) \frac{S(E=0)}{C_1} = \sqrt{(7.70)^2 - 13.74 t^2}$$

$$\beta) \frac{S(E=0)}{C_1} = (\sqrt{7.70} - 0.177\sqrt{t})^2$$

Στο σχήμα 6.7 φαίνεται η συμπεριφορά του $\frac{S}{C_1}$ συναρτήσεως του t , για σύζευξη επιπέδων, ανάλογα με το ποια από τις παραπάνω

προσεγγίσεις χρησιμοποιούμε. Παρατηρούμε ότι και οι τρεις προσεγγίσεις δίνουν τα σωστά όρια για $t=0$ και $t=1$.



Σχημα 6.7: Τρεις διαφορετικές προσεγγίσεις του S/C_1 για t μεταξύ 0 και 1.

Υπολογίζουμε την κρίσιμη αταξία W_c για διάφορα t μεταξύ 0 και 1, χρησιμοποιώντας καθεμία από τις τρεις αυτές προσεγγίσεις. Τα αποτελέσματα δίνονται στον παρακάτω πίνακα 14.

Πίνακας 14

t	W_c (γραμμική)	W_c (α)	W_c (β)
0.1	7.12	7.08	7.18
0.2	8.98	8.91	9.08
0.5	12.55	12.37	12.68
0.8	15.09	14.92	15.14

Στην πρώτη στήλη του πίνακα δίνουμε την ανισοτροπία t που χρησιμοποιήσαμε, στη δεύτερη στήλη είναι η κρίσιμη αταξία W_c χρησιμοποιώντας τη γραμμική προσέγγιση για το $\frac{S}{C_1}$, στην τρίτη

στήλη είναι τα W_c που παίρνουμε χρησιμοποιώντας την προσέγγιση

(α) για το $\frac{S}{C_l}$, ενώ στην τέταρτη στήλη δίνονται τα αντίστοιχα W_c

χρησιμοποιώντας την προσέγγιση (β) για το $\frac{S}{C_l}$. Παρατηρούμε ότι

τα αποτελέσματα στις δύο τελευταίες στήλες του πίνακα 18 δεν διαφέρουν σημαντικά από τα αποτελέσματα με τη γραμμική

προσέγγιση του $\frac{S}{C_l}$, γι'αυτό και στο εξής θα παίρνουμε γραμμική

προσέγγιση, χωρίς μεγάλο λάθος.

Υπολογισμός των $Im G^{(3)}$ για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων

Στην παράγραφο αυτή, θα υπολογίσουμε αναλυτικές εκφράσεις για τα $Im G^{(3)}(0,0,0;E=0)$, $Im G^{(3)}(0,0,2;E=0)$ και $Im G^{(3)}(2,0,0;E=0)$, όπου $G^{(3)}$ είναι η συνάρτηση Green για τρισδιάστατο σύστημα ασθενώς συζευγμένων αλυσίδων. Η γενική συνάρτηση Green γράφεται:

$$G^{(3)}(\vec{l}, \vec{m}; z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{\cos(l_1 - m_1)\varphi_1 \cos(l_2 - m_2)\varphi_2 \cos(l_3 - m_3)\varphi_3}{z - 2t_x \cos\varphi_1 - 2t_y \cos\varphi_2 - 2t_z \cos\varphi_3}$$

Ορίζουμε: $(t_x, t_y, t_z) = (t, t, l)$ με $0 \leq t \leq 1$ **άρα**

$$G^{(3)}(\vec{l}, \vec{m}; z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{\cos(l_1 - m_1)\varphi_1 \cos(l_2 - m_2)\varphi_2 \cos(l_3 - m_3)\varphi_3}{z - 2t \cos\varphi_1 - 2t \cos\varphi_2 - 2l \cos\varphi_3}$$

$$\begin{aligned} \text{Im } G^{(3)}(0,0,0;E=0) &= \frac{\text{Im}}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_2 \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 \frac{1}{is-2t\cos\varphi_1-2t\cos\varphi_2-2t\cos\varphi_3} = \\ &= \frac{\text{Im}}{(2\pi)} \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi_3 G^{(2)}(0,0;-2t\cos\varphi_3) \end{aligned}$$

όπου $G^{(2)}(0,0;-2t\cos\varphi_3)$ είναι η Green συνάρτηση διδιάστατου πλέγματος, στην ενέργεια $-2t\cos\varphi_3$. Γνωρίζουμε [Economou (1983)] ότι

$$\text{Im } G^{(2)}(0,0;E) = \frac{2}{\pi(4V)} \mathbf{K} \left(\sqrt{1 - \frac{E^2}{(4t)^2}} \right) \text{ αν } |E| < 4t, \text{ ενώ}$$

$$\text{Im } G^{(2)}(0,0;E) = 0 \text{ αν } |E| \geq 4t.$$

Έτσι παίρνουμε ότι

$$\text{Im } G^{(3)}(0,0,0;E=0) = 0 \text{ αν } |\cos\varphi_3| \geq 2t \text{ ενώ}$$

$$\text{Im } G^{(3)}(0,0,0;E=0) = \frac{1}{\pi^2 t} \int_0^{\pi/2} d\varphi_3 \mathbf{K} \text{ αν } || < 2t.$$

\Rightarrow

$\Rightarrow = \Rightarrow$

$\Rightarrow =$

\mathbf{K} αν $|| < 2t$

ενώ είναι $=0$ αν $|| \geq 2t$

\Rightarrow

$\Rightarrow =$

Γνωρίζουμε [Economou, Soukoulis et.al. (1984)] ότι:

$\mathbf{EK} \Rightarrow$

όπου $=$

$\Rightarrow = \mathbf{E} + \mathbf{K} \Rightarrow$

$\Rightarrow = \mathbf{K} \mathbf{E} + \mathbf{K} \Rightarrow$

$\Rightarrow = -4 \mathbf{E} + \mathbf{K}$ αν $|E| < 4t.$

Έτσι παίρνουμε ότι:

$= -4 \mathbf{E} + \mathbf{K}$ αν $|| < 2t$

ενώ $=0$ αν $\| \geq 2t$.

Όρια των όταν $t \rightarrow 0$ για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων

Στην παράγραφο αυτή, θα υπολογίσουμε τις οριακές τιμές των $(0,0,0;E=0)$, $(0,0,2;E=0)$, , όταν $t \rightarrow 0$, για σύζευξη αλυσίδων.

\Rightarrow

$\Rightarrow = \Rightarrow$

$\Rightarrow \Rightarrow$

Είναι:

\Rightarrow

\Rightarrow

\Rightarrow

$\Rightarrow =$

Είναι: \Rightarrow

\Rightarrow

Άρα:

\Rightarrow

\Rightarrow

$\Rightarrow \Rightarrow$

$\Rightarrow =$

$=$

\Rightarrow

\Rightarrow

Συνοψίζοντας τα παραπάνω αποτελέσματα, είναι:

.

Όρια των και όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων

Στο όριο ασθενούς σύζευξης αλυσίδων, $t \rightarrow 0$, είναι:

$$(0,0,0;E=0)-$$

$$(0,0,0;E=0) -$$

Το δίνεται από τη σχέση (34) του παραρτήματος A2. Παίρνοντας το όριο για $t \rightarrow 0$ έχουμε:

Ο κρίσιμος χρόνος εφησυχασμού, , για σύζευξη αλυσίδων, δίνεται από τη σχέση (37) του παραρτήματος A2. Παίρνοντας το όριο για $t \rightarrow 0$ έχουμε:

$$\Rightarrow .$$

Αντικαθιστώντας το με την τιμή του για $t=0$, όπου την παίρνουμε ίση με , έχουμε:

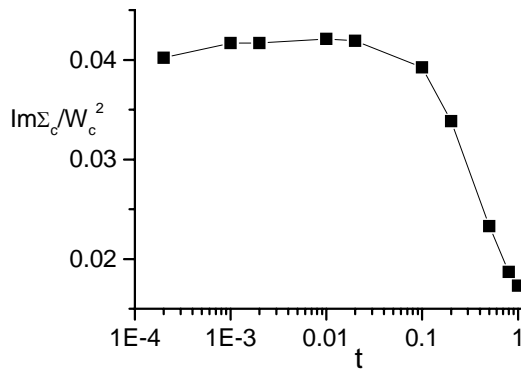
\Rightarrow .

CPA για σύζευξη αλυσίδων

Εφαρμόζοντας τη μέθοδο CPA, την οποία περιγράψαμε στην παράγραφο 5.2, μπορούμε να υπολογίσουμε το και το χρόνο εφησυχασμού τ για κάποια αταξία W , μέσω των σχέσεων (5.28) και (5.29). Η κρίσιμη αταξία είναι εκείνη που αντιστοιχεί σε χρόνο εφησυχασμού τ , ίσο με το που υπολογίζουμε μέσω της σχέσης (37) του παραρτήματος A2 για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων. Με τον τρόπο αυτό, υπολογίζουμε την κρίσιμη αταξία και το , για διάφορες τιμές της ανισοτροπίας t . Τα αποτελέσματα του συναρτήσεως του t φαίνονται στο σχήμα 9b του παραρτήματος A2, και συγκρίνονται με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που έχουμε πάρει μέσω της αριθμητικής μεθόδου των πινάκων μεταφοράς.

Στο σχήμα 6.8 βλέπουμε τη συμπεριφορά του συναρτήσεως του t . Βλέπουμε ότι για $t < 0.1$, η τιμή του είναι σχεδόν σταθερή και ίση με 0.041 περίπου. Έτσι μπορούμε να γράψουμε για μικρά t τη σχέση 0.041. Αντικαθιστώντας την στην (5.29) και λαμβάνοντας υπόψη το όριο του για $t \rightarrow 0$, έχουμε:

(όταν $t \rightarrow 0$).



Σχημα 6.8: Η συμπεριφορά του $\text{Im}\Sigma_c/W_c^2$ συναρτήσει του t , για συζευξη αλυσιδων.

Χρησιμοποιώντας τα ακριβή αριθμητικά αποτελέσματα της CPA για $t < 0.1$, βρίσκουμε την έκφραση που δείχνει όμοια συμπεριφορά με την παραπάνω εξίσωση. Τα αριθμητικά αποτελέσματα με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς, δίνουν μια συμπεριφορά της μορφής . Πρέπει να σημειώσουμε εδώ, ότι αυτά τα αποτελέσματα είναι πολύ λίγα και όχι για πολύ μικρά t , γιατί είναι πολύ χρονοβόρος ο υπολογισμός τους. Για τον ίδιο λόγο, τα σφάλματα στους υπολογισμούς αυτούς δεν είναι πολύ μικρά. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που έχουμε βγάλει με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς, φαίνονται στον παρακάτω πίνακα:

t		
0.01	1.25	0.05
0.1	4.05	0.15
0.3	7.65	0.15

Υπολογισμός των γ για σύστημα συζευγμένων επιπέδων

Στην παράγραφο αυτή, θα υπολογίσουμε αναλυτικές εκφράσεις για τα $(0,0,0;E=0)$, και , όπου είναι η συνάρτηση Green για τρισδιάστατο σύστημα ασθενώς συζευγμένων επιπέδων. Η γενική συνάρτηση Green γράφεται:

Ορίζουμε με $0 \leq t \leq 1$ άρα:

$= =$
 $=$
 όπου είναι η συνάρτηση Green διδιάστατου πλέγματος στην ενέργεια . Κατά συνέπεια [Economidou (1983)] έχουμε $(0,0,0;E=0) = \mathbf{K}$ γιατί πάντα είναι $\| \cdot \| < 2$.

$= =$
 $= \mathbf{K}$
 γιατί πάντα είναι $\| \cdot \| < 2$.

$= =$
 $=$
 Γνωρίζουμε [Economidou, Soukoulis et al (1984)] ότι:

\mathbf{EK} όπου =

Έτσι έχουμε: $\mathbf{E} + \mathbf{K}$ αν $E < 4t$.

Εφαρμόζοντάς το στην περίπτωση μας, είναι:

$(2,0,0;E) = \mathbf{E} + \mathbf{K}$

όπου .

Όρια των όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων επιπέδων

Για σύστημα ασθενώς συζευγμένων επιπέδων, τα όρια των όταν $t \rightarrow 0$ είναι [Economou (1983), Qiming Li et al (1989)] τα εξής:

$$(0,0,0;0)$$

$$(0,0,2;0)$$

$$(2,0,0;0)$$

Όρια των και όταν $t \rightarrow 0$, για σύστημα συζευγμένων επιπέδων

Για σύστημα ασθενώς συζευγμένων επιπέδων, όταν $t \rightarrow 0$, είναι:

$$(0,0,0;0) - (0,0,2;0)$$

$$(0,0,0;0) - (2,0,0;0)$$

Για το όπως έχει οριστεί στο παράρτημα A2 (για σύζευξη επιπέδων), σε συνδυασμό με τα παραπάνω όρια, παίρνουμε:

.

Ξεκινώντας από τη σχέση (27) του A2, θα πάρουμε το όριο του κρίσιμου χρόνου εφησυχασμού όταν $t \rightarrow 0$.

·

Αντικαθιστώντας την $t=0$ τιμή του τ που είναι 7.70 περίπου, παίρνουμε:

·

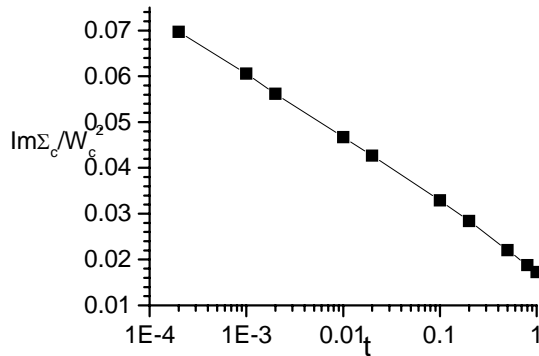
CPA για σύζευξη επιπέδων

Εφαρμόζοντας την CPA μέθοδο την οποία περιγράψαμε στην παράγραφο 5.2, μπορούμε να υπολογίσουμε το τ_c και το χρόνο εφησυχασμού τ για κάποια αταξία W , μέσω των σχέσεων (5.28) και (5.29). Η κρίσιμη αταξία είναι εκείνη που αντιστοιχεί σε χρόνο εφησυχασμού τ , ίσο με το τ_c που υπολογίζουμε

μέσω της σχέσης (27) του παραρτήματος A2, για σύστημα συζευγμένων επιπέδων. Με τον τρόπο αυτό, υπολογίζουμε την κρίσιμη αταξία W_c και το τ_c , για διάφορες τιμές της ανισοτροπίας t . Τα αποτελέσματα του συναρτήσεως του τ φαίνονται στο σχήμα 9α του παραρτήματος A2, και συγκρίνονται με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που έχουμε πάρει μέσω της αριθμητικής μεθόδου των πινάκων μεταφοράς.

Στο σχήμα 6.9 φαίνεται η συμπεριφορά του συναρτήσεως του τ , και παρατηρούμε ότι είναι μια ευθεία φθίνουσα (έχοντας λογαριθμική

κλίμακα στον άξονα του t). Βρίσκοντας κλίση και διατομή της ευθείας συναρτήσεως του $\ln t$, για $t < 0.1$, μπορούμε να γράψουμε τη σχέση: . Δηλαδή παρατηρούμε ότι η σχέση μεταξύ και περιέχει και εξάρτηση από το $\ln t$.



Σχημα 6.9: Η συμπεριφορά του $\text{Im}\Sigma_c/W_c$ συναρτήσεως του t , για συζευξη επιπέδων.

Στη σχέση (5.29) αντικαθιστούμε το με την έκφρασή του στο όριο $t \rightarrow 0$, και το από την παραπάνω έκφραση συναρτήσεως του και του $\ln t$.

Αυτή η σχέση είναι η οριακή έκφραση για $t \rightarrow 0$, του συναρτήσεως του t . Στον παρακάτω πίνακα δίνουμε μερικά που υπολογίζουμε μέσω αυτής της σχέσης, και τα συγκρίνουμε με τα αποτελέσματα που δίνει η ακριβής έκφραση της CPA. Όπως περιμένουμε, η συμφωνία είναι καλύτερη όσο πηγαίνουμε σε μικρότερα t , όπου η παραπάνω προσεγγιστική έκφραση ισχύει καλύτερα.

t	(προσεγγ)	(ακριβές)
1.0	15.12	16.50
0.1	6.99	7.12
0.01	3.46	3.50
0.001	1.77	1.78

Υπολογισμός της Πυκνότητας Καταστάσεων

Η πυκνότητα καταστάσεων (Π.Κ.) $\rho(E)$ ενός συστήματος με Green συνάρτηση την G δίνεται [Economidou (1983)] από τη σχέση:

Για σύζευξη αλυσίδων, είναι:

$$\Rightarrow \Rightarrow \Rightarrow$$

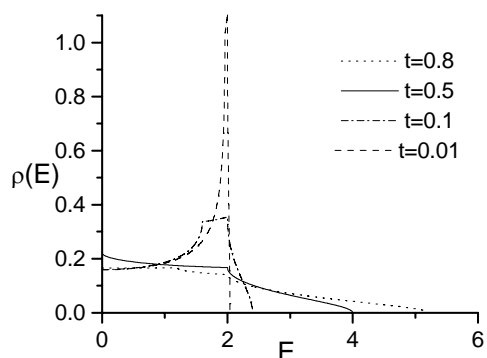
$$\Rightarrow = K \text{ αν,}$$

ενώ είναι 0 αν .

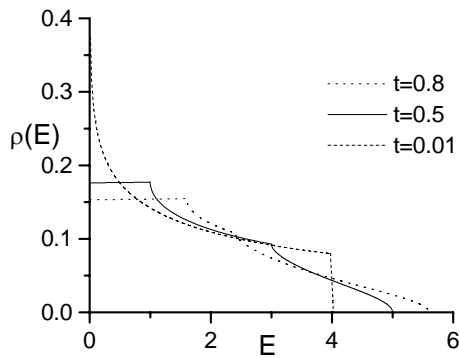
Για σύζευξη επιπέδων είναι: \Rightarrow

$$\Rightarrow \Rightarrow \Rightarrow = K \text{ αν ενώ είναι } = 0 \text{ αν .}$$

Στα σχήματα 6.10 και 6.11 φαίνεται η πυκνότητα καταστάσεων σαν συνάρτηση της ενέργειας για διάφορες τιμές ανισοτροπίας t , για σύστημα συζευγμένων αλυσίδων και για σύστημα συζευγμένων επιπέδων αντίστοιχα.



Σχήμα 6.10: Η πυκνότητα καταστάσεων για μερικές τιμές της ανισοτροπίας t , σε σύστημα συζευγμένων αλυσίδων



Σχημα 6.11: Η πυκνότητα καταστάσεων για μερικές τιμές της ανισοτροπίας t , σε σύστημα συζευγμένων επιπέδων

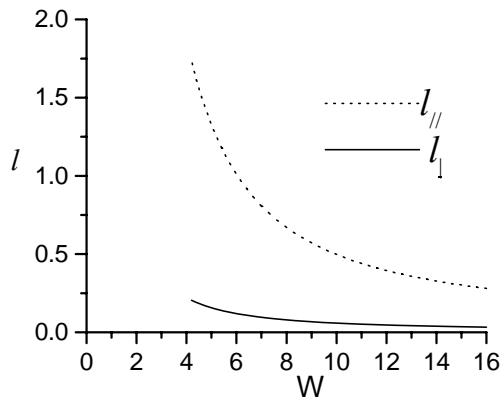
Μέση ελεύθερη διαδρομή, παράλληλα και κάθετα στα επίπεδα

Ξεκινώντας από τη σχέση (16) του παραρτήματος A2, ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή στην i - διεύθυνση είναι ℓ_i , μπορούμε να υπολογίσουμε τη μέση ελεύθερη διαδρομή για διάδοση παράλληλα και κάθετα σε συζευγμένα επίπεδα.

Ορίζοντας ότι η z -διεύθυνση είναι η διεύθυνση κάθετα στα επίπεδα, γράφουμε ℓ_z και ℓ_{\parallel} . Χρησιμοποιώντας τη σχέση (23) του A2, που μας δίνει το ℓ_i για σύζευξη επιπέδων, τα και γράφονται: και ℓ_z και ℓ_{\parallel} . Από τις σχέσεις αυτές υπολογίζουμε τα ℓ_z και ℓ_{\parallel} συναρτήσει του W , λαμβάνοντας υπόψη τις σχέσεις (24), (25), (31) και (43) του A2, που μας δίνουν τις παρακάτω ποσότητες, απαραίτητες για τον υπολογισμό των ℓ_z και ℓ_{\parallel} .

Η γραφική παράσταση των ℓ_z και ℓ_{\parallel} συναρτήσει του W , για ανισοτροπία $t=0.1$, φαίνεται στο σχήμα 6.12. Ο λόγος ℓ_z/ℓ_{\parallel} είναι ίσος με $\frac{1}{2}$, όπως

μπορούμε να δούμε και από τις παραπάνω εξισώσεις.



Σχημα 6.12: Μεση ελευθερη διαδρομη συναρτησει του W για διαδοση παραλληλα και καθετα στα επιπεδα, και ανισοτροπια $t=0.1$.

Σύνοψη συμπερασμάτων του ΜΕΡΟΥΣ Ι

Στο ΜΕΡΟΣ Ι μελετήσαμε αριθμητικά και αναλυτικά τη διάδοση και τον εντοπισμό ηλεκτρονικού κύματος σε άτακτα συστήματα ασθενώς συζευγμένων επιπέδων και ασθενώς συζευγμένων αλυσίδων. Τα βασικά συμπεράσματα αυτής της μελέτης συνοψίζονται παρακάτω :

—Η κρίσιμη αταξία για μετάβαση μετάλλου-μονωτή είναι ίδια για διάδοση του κύματος σε διαφορετικές διευθύνσεις.

—Για εκτεταμένες καταστάσεις είναι , ενώ για εντοπισμένες καταστάσεις είναι .

—Ο γεωμετρικός μέσος όρος των κρίσιμων στις τρεις διευθύνσεις είναι 0.6 για σύστημα συζευγμένων επιπέδων και σύστημα συζευγμένων αλυσίδων . Μόνο για σύστημα συζευγμένων επιπέδων ισχύει .

—Οι προβλέψεις για το με αυτοσυνεπή θεωρία, είναι σε συμφωνία με ανεξάρτητα αριθμητικά αποτελέσματα:

Για ασθενώς συζευγμένα επίπεδα είναι ~

Για ασθενώς συζευγμένες αλυσίδες είναι ~.

ΜΕΡΟΣ II: Μελέτη συστήματος τυχαία συζευγμένων αλυσίδων

Το μοντέλο που μελετάμε σ' αυτό το μέρος της εργασίας είναι ένα μοντέλο ισχυρής δέσμησης με αλληλεπίδραση μόνο πρώτων γειτόνων, με στοιχεία πίνακα μετάβασης $V=1$ στην z -διεύθυνση, ενώ στις διευθύνσεις x και y καθένα στοιχείο πίνακα μπορεί να έχει την τιμή J με πιθανότητα c ή την τιμή μηδέν με πιθανότητα $1-c$. Όταν $c=1$ υπάρχουν όλα τα στοιχεία πίνακα J , ενώ όταν $c=0$ δεν υπάρχει κανένα J . Έτσι το c εκφράζει το ποσοστό των J που υπάρχουν, δηλαδή τη συγκέντρωσή τους. Τα στοιχεία πίνακα $V=1$ στην z -διεύθυνση ορίζουν ένα σύνολο από αλυσίδες, οι οποίες είναι συζευγμένες μεταξύ τους με τα τυχαία κατανομημένα στοιχεία πίνακα J . Όταν $c=0$ το σύστημα γίνεται ένα σύνολο ασύζευκτων μονοδιάστατων αλυσίδων, ενώ όταν $c=1$ είμαστε στο απλό κυβικό τρισδιάστατο σύστημα. Δηλαδή η μεταβολή του c από 0 σε 1 είναι σαν μια μετάβαση από μία διάσταση ($1d$) σε τρεις διαστάσεις ($3d$). Η χαμιλτονιανή και οι εξισώσεις που περιγράφουν το σύστημα φαίνονται στα παραρτήματα A3 και A4.

Στο μοντέλο αυτό έχουμε δύο πηγές ανισοτροπίας. Η μία πηγή είναι το c που όταν είναι διαφορετικό του 1 δίνει μια τυχειότητα στο σύστημα, και η άλλη πηγή ανισοτροπίας είναι το J που όταν είναι διαφορετικό της μονάδας υπάρχει επιπλέον ανισοτροπία, μια και τα στοιχεία πίνακα στην z -διεύθυνση είναι ίσα με μονάδα. Στην παράγραφο 6.2.1 θα μελετήσουμε το σύστημα για $J=1$, έχοντας ανισοτροπία μόνο λόγω του c , στην παράγραφο 6.2.2 θα δούμε τα αποτελέσματα της ανισοτροπίας λόγω J και c μαζί, ενώ τέλος στην παράγραφο 6.2.3 θα περιγράψουμε μια εφαρμογή του μοντέλου μας

στα αγώγιμα πολυμερή και θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας με τα αποτελέσματα μιας θεωρίας πεδίου.

Η μελέτη έγινε με τη μέθοδο των πινάκων μεταφοράς που περιγράφηκε στην παράγραφο 5.1. Ο τρόπος υπολογισμού του ελάχιστου L.E. και του σφάλματός του έχει περιγραφεί στην παράγραφο 6.1.1.2. Τα συμπεράσματα και τα σχόλια όλης της μελέτης υπάρχουν στα παραρτήματα A3 και A4 τεκμηριωμένα και με σχήματα. Στις επόμενες παραγράφους θα αναφερθούμε σ'αυτά περιληπτικά και θα συμπληρώσουμε μόνο ότι επιπλέον στοιχεία δεν είναι γραμμένα στα A3 και A4. Όμως για την πλήρη μελέτη του προβλήματος, είναι απαραίτητη και η ανάγνωση των A3 και A4.

Ανισοτροπία λόγω του $c \neq 1$

Έχοντας $J=1$, δηλαδή ανισοτροπία μόνω λόγω του , υπολογίσαμε την κρίσιμη αταξία για διάφορες τιμές του $c=0.1, 0.2, \dots, 0.9, 1$. Τα σχήματα 1, 2, 3 και 5 του A4 αναφέρονται σε αριθμητικά δεδομένα για $J=1$, $c=0.6$ και $E=0$, ενδεικτικά, για να δούμε ότι ισχύει η θεωρία κλίμακας που ξέραμε για ισότροπα συστήματα, παρά την ανισοτροπία του παρόντος μοντέλου. Ακολουθώντας την ίδια διαδικασία με αυτή που περιγράφηκε για $c=0.6$, υπολογίσαμε το και για τις υπόλοιπες τιμές του c . Η καμπύλη του συναρτήσεως του c για $J=1$ φαίνεται στο σχήμα 8 του παραρτήματος A4. Στην παράγραφο III του A4 περιγράφεται αναλυτικά και ο τρόπος υπολογισμού του σφάλματος του .

Υπολογισμός του εκθέτη ν

Υπολογίζουμε τον εκθέτη ν για $J=1$, $c=0.6$, $E=0$ και με $M=9, 11, 13$. Τα αριθμητικά δεδομένα που χρησιμοποιούμε σ' αυτό τον υπολογισμό, τα έχουμε πάρει από ένα δείγμα μήκους $L=100000$ όταν πήραμε το γινόμενο των πινάκων μεταφοράς. Στον πίνακα 15 δίνουμε τα αριθμητικά δεδομένα για τα ν που χρησιμοποιούμε.

Πίνακας 15

<hr/>			
W			
<hr/>			
11.0	1.229	1.3118	1.3810
	1		
11.6	1.023	1.0784	1.1036
	5		
11.8	0.978	0.9943	1.0325
	1		
12.0	0.918	0.9467	0.9676
	3		
12.2	0.874	0.8809	0.9007
	2		
12.6	0.791	0.7992	0.7980
	4		

13.0	0.710	0.7086	0.7022
	9		
13.4	0.660	0.6434	0.6165
	6		
13.8	0.600	0.5779	0.5623
	9		

Ο τρόπος υπολογισμού του ν είναι αυτός που περιγράψαμε στην παράγραφο 6.1.1.5 και εφαρμόσαμε στις παραγράφους 6.1.1.6, 6.1.1.7, κ.τ.λ. Στον πίνακα 16 δίνουμε τις κλίσεις και τον υπολογισμό του ν , έχοντας χρησιμοποιήσει τα δεδομένα του πίνακα 15.

Πίνακας 16

					ν
11.0	12.0	0.3108	0.3651	0.4134	1.29
11.6	12.0	0.263	0.3293	0.3400	1.40
11.6	12.6	0.2321	0.2792	0.3056	1.33
11.8	12.2	0.2597	0.2835	0.3295	1.56
11.8	12.6	0.2334	0.2439	0.2931	1.65
12.0	12.6	0.2115	0.2458	0.2827	1.27
13.0	13.4	0.1258	0.1630	0.2143	0.70

13.0

13.8

0.1375

0.1634

0.1749

1.51

Η μέση τιμή του v είναι 1.34 με τυπική απόκλιση μέσης τιμής 0.10 . Δηλαδή για $c=0.6$ και $E=0$, υπολογίσαμε $v=1.3\pm 0.1$ που είναι πολύ κοντά στη γνωστή τιμή του v για ισότροπο τρισδιάστατο σύστημα. Επομένως από τα παραπάνω φαίνεται ότι η τιμή του v είναι ανεξάρτητη από το c .

Ανισοτροπία λόγω $J\neq 1$ και $c\neq 1$

Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε το σύστημά μας, έχοντας ανισοτροπία όχι μόνο λόγω του c , αλλά και λόγω της τιμής J του στοιχείου πίνακα μετάβασης μεταξύ αλυσίδων, που το παίρνουμε διαφορετικό της μονάδας.

Πρέπει να σημειώσουμε εδώ, ότι σε ένα τέτοιο σύστημα το J έχει διπλό ρόλο στον εντοπισμό. Καταρχήν, επειδή το J είναι στοιχείο πίνακα μετάβασης που συνδέει διαφορετικές αλυσίδες, διευκολύνει τη διάδοση του ηλεκτρονιακού κύματος προσφέροντας επιπλέον δρόμους στο ηλεκτρόνιο για να προχωρήσει, κι έτσι δυσκολεύει τον εντοπισμό. Από την άλλη πλευρά όμως υπάρχει η πιθανότητα $c\neq 1$, με αποτέλεσμα τα J που είναι τυχαία κατανεμημένα στο χώρο να προσφέρουν μια επιπλέον τυχειότητα στο σύστημα, η οποία βοηθάει τον εντοπισμό του ηλεκτρονιακού κύματος. Ο συνδυασμός των δύο αυτών ρόλων του J είναι που αποφασίζει, για κάποια συγκεκριμένα J και c , αν το ηλεκτρονιακό κύμα θα εντοπιστεί εύκολα ή δύσκολα, δηλαδή αν η διαγώνια αταξία θα πρέπει να είναι μικρή ή μεγάλη.

Στο σχήμα 8 του A4 φαίνεται η εξάρτηση του α από το c , για διάφορες τιμές του J μικρότερες και μεγαλύτερες της μονάδας. Παρατηρούμε ότι για $J \leq 1$ το α αυξάνει μονότονα με την αύξηση του c και η καμπύλη έχει συνεχώς τα κοίλα προς τα κάτω. Όμως για $J > 1$ παρατηρούμε ότι στην περιοχή μικρών τιμών του c το σύστημα εντοπίζεται πολύ εύκολα και μάλιστα τόσο πιο εύκολα όσο μεγαλύτερο J έχουμε. Όπως καταλαβαίνουμε, στην περιοχή αυτή τιμών υπερισχύει ο δεύτερος ρόλος του J που βοηθάει στον εντοπισμό. Και το σχήμα 9 του A4 επιβεβαιώνει τα παραπάνω, βλέποντας ότι για $c < 1$ το α αυξάνει μέχρι ένα σημείο με την αύξηση του J , και τότε υπερισχύει ο πρώτος ρόλος του J που βοηθάει στον απεντοπισμό, ενώ στη συνέχεια το α μειώνεται με περαιτέρω αύξηση του J , και αυτό μας δείχνει ότι υπερισχύει ο δεύτερος ρόλος του. Στο σχήμα 11 του A4 δίνουμε αριθμητικά αποτελέσματα της κρίσιμης ενέργειας μετάβασης συναρτήσεως του J , για $c=0.4$ και $W=0$. Παρατηρούμε ότι για $E=0$ οι καταστάσεις είναι εκτεταμένες, και δεν φαίνεται να μπορεί να εντοπίσει όλες τις καταστάσεις η αύξηση του J λόγω του υπερισχύοντος δεύτερου ρόλου του. Χρειάζεται και κάποια μη μηδενική διαγώνια αταξία W για τον εντοπισμό όλων των καταστάσεων όταν $E=0$. Περισσότερο αναλυτική συζήτηση και τεκμηρίωση με σχήματα για τη μελέτη του συστήματος αυτού που περιέχει ανισοτροπία λόγω J και c υπάρχει στο παράρτημα A4.

Εναλλακτικός τρόπος υπολογισμού του α και του ν

Ορίζουμε τα σύμβολα α και β . Γνωρίζουμε ότι η γραφική παράσταση του συναρτήσεως του κοντά στο α και για ένα συγκεκριμένο M , είναι μια ευθεία με κλίση α και διατομή β . Κάνοντας αυτή τη γραφική παράσταση για πολλά διαφορετικά M , παίρνουμε ένα σύνολο από ευθείες που τέμνονται σε ένα σημείο το οποίο ορίζει το κρίσιμο σημείο μετάβασης. Σ'αυτή τη γραφική παράσταση, το σημείο αυτό αντιστοιχεί σε συντεταγμένες (α, β) , οι οποίες θα μπορούσαν ίσως να διαβαστούν από τη γραφική παράσταση κι έτσι θα βρίσκαμε το α . Όμως στην πράξη, επειδή υπάρχουν μη μηδενικά σφάλματα και διακυμάνσεις στα αριθμητικά δεδομένα που χρησιμοποιούμε, οι ευθείες τέμνονται ανά δύο σε παραπλήσια σημεία, κι έτσι είναι δύσκολο να διαβαστεί το α κατευθείαν. Παρακάτω, θα περιγράψουμε έναν τρόπο υπολογισμού του α και του κρίσιμου εκθέτη β , ξεκινώντας από αυτήν τη γραφική παράσταση που περιγράψαμε μόλις πριν.

Για κάθε M , αφού η γραφική παράσταση είναι ευθεία, θα ισχύει:

$$(6.14)$$

ενώ η κλίση γράφεται:

$$\Rightarrow (6.15)$$

Από (6.14) και (6.15) παίρνουμε:

$$(6.16)$$

Επομένως, κάνοντας τη γραφική παράσταση του συναρτήσεως του α , περιμένουμε να είναι ευθεία με κλίση α και διατομή β . Από την κλίση αυτής της ευθείας, υπολογίζουμε το α .

Ένας εναλλακτικός τρόπος [Katsanos *et al* (1997)] υπολογισμού του α περιγράφεται παρακάτω:

Από τις σχέσεις (6.14) και (6.16) παίρνουμε

$$(6.17)$$

Γνωρίζουμε γενικά ότι $\log(1+x) \approx x$ για πολύ μικρά x , οπότε μπορούμε να γράψουμε $\log(1+x) \approx x$ για $x \ll 1$.

Επίσης είναι

Έτσι μέσω της (6.17) παίρνουμε

$$(6.18)$$

Για να ισχύει η υπόθεση κλίμακας, δηλαδή ότι τοξαρτάται από το λόγο $\frac{W}{L}$, θα πρέπει στην (6.18) να είναι το $\frac{W}{L} \ll 1$ (6.19)

Επομένως τον εκθέτη ν μπορούμε να τον υπολογίσουμε σαν το αντίστροφο της κλίσης της γραμμικής σχέσης μεταξύ $\log(W)$ και $\log(L)$.

Παρακάτω εφαρμόζουμε τη μέθοδο που μόλις περιγράψαμε για τον υπολογισμό του ν και του α στα αριθμητικά αποτελέσματα από δύο σετ παραμέτρων. Πρώτα για $J=0.3$, $c=0.6$ και $E=0$ δίνουμε στον πίνακα (17) τα αριθμητικά αποτελέσματα για διάφορα W , που έχουμε πάρει από αριθμητικούς υπολογισμούς σε ένα δείγμα κάθε φορά μήκους 100000 πλεγματικές θέσεις.

Πίνακας 17

W			
4.9	7.5131	8.0548	8.8535
5.2	5.4437	6.010	6.1958
5.5	4.3435	4.5517	4.662

5.8	3.3179	3.2664	3.454
6.1	2.6738	2.590	2.646
6.7	1.6559	1.6280	1.561
7.0	1.388	1.335	1.260
7.3	1.1822	1.105	1.0477
7.6	1.0045	0.9324	0.8772
8.0	0.8304	0.7581	0.7123
8.5	0.6835	0.6093	0.5650

Η γραφική παράσταση των \log συναρτήσεων του $\log M$ για $M=11, 13, 15$ είναι το σχήμα 10α του Α4. Με τη μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων υπολογίζουμε την κλίση και τη διατομή για κάθε M . Τα αποτελέσματα φαίνονται στον πίνακα 18.

Πίνακας 18

M		
11	-4.42	3.90
13	-4.77	4.18
15	-5.07	4.42

Τα συναρτήσεων των μ μας δίνουν μια ευθεία φθίνουσα, με κλίση -0.800 . Επομένως $-\log = -0.800 \Rightarrow \dots$. Για τον υπολογισμό του εκθέτη ν βρίσκουμε την κλίση της ευθείας \log συναρτήσεων του $\log M$, η οποία είναι 0.443 , και άρα $\Rightarrow \nu$. Παρατηρούμε ότι εδώ ο υπολογισμός του ν δεν είναι ακριβής, ίσως γιατί δεν χρησιμοποιήσαμε τιμές του M μεγαλύτερες του 15 .

Τώρα θα εφαρμόσουμε την ίδια μέθοδο σε αριθμητικά δεδομένα για $J=10, c=1, E=0$, και τα οποία τα έχουμε πάρει από αριθμητικούς υπολογισμούς σε 20 διαφορετικά δείγματα κάθε φορά και παίρνοντας μέση τιμή, όπως έχουμε εξηγήσει στην παράγραφο 6.1.1.2. Τα αριθμητικά δεδομένα για διάφορα W και για $M=7, 11, 13, 15, 17$ δίνονται στον πίνακα 19.

Πίνακας 19

W					
70	0.1387	0.1331	0.1337	0.1375	0.1387
75	0.1307	0.1218	0.1225	0.1225	0.1238
78	0.1366	0.1165	0.1159	0.1145	–
80	0.1242	0.1135	0.1125	0.1109	0.1120
83	–	–	–	0.1056	0.1048
85	0.1184	0.1061	0.1032	0.1019	0.1004
90	0.1125	0.0987	0.0954	0.0925	0.0909

Στο σχήμα 10b του Α4 φαίνονται οι ευθείες του \log συναρτήσεων του $\log W$ για τα διάφορα M . Παρατηρούμε ότι το κρίσιμο σημείο δεν

φαίνεται καθαρά από τη γραφική παράσταση, αφού τα σημεία που τέμνονται οι ευθείες είναι πολλά διαφορετικά αλλά κοντά μεταξύ τους, εκτός από το $M=7$ που πραγματικά ξεφεύγει από τα υπόλοιπα. Το $M=7$ δεν θα το λάβουμε υπόψη στους υπολογισμούς μας, αλλά το δείχνουμε στη γραφική παράσταση για να δείξουμε ακόμη μία φορά ότι όσο πιο μικρά M πάρουμε τόσο πιο μεγάλο λάθος μπορεί να κάνουμε στον υπολογισμό του β , όπως είχαμε δει και είχαμε αναπτύξει και στη γραφική παράσταση 1 του A1. Χρησιμοποιώντας τα $M= 11, 13, 15, 17$ παίρνουμε τις εξής κλίσεις και διατομές:

Πίνακας 20

M		
11	-1.17	1.28
13	-1.35	1.61
15	-1.55	1.99
17	-1.68	2.24

Η ευθεία του συναρτήσεως του β , έχει κλίση -1.88, κι έτσι $\beta = 75.9$. Η τιμή αυτή του β που βρήκαμε είναι μικρότερη από την τιμή β που είχαμε βρει με την άλλη μέθοδο που χρησιμοποιήσαμε για τον υπολογισμό όλων των β αυτής της εργασίας. Από τη γραφική παράσταση 10b του A4 βλέπουμε ότι οι ευθείες που αντιστοιχούν σε

μεγαλύτερο M , τέμνονται μεταξύ τους σε μεγαλύτερα W , και μάλιστα τα σημεία τομής τους είναι πιο κοντά μεταξύ τους. Λόγω αυτού, πιστεύουμε ότι αν μπορούσαμε να έχουμε υπολογισμούς και για $M > 17$, το που θα υπολογίζαμε με την παρούσα μέθοδο θα ήταν σε συμφωνία με το που υπολογίσαμε με την άλλη μέθοδο σ' αυτή την εργασία. Για τον υπολογισμό του εκθέτη ν , βρίσκουμε την κλίση της ευθείας \log συναρτήσει $\log M$, η οποία είναι 0.847 και κατά συνέπεια $\nu \Rightarrow \nu$.

Υπολογισμός του ν

Στην παράγραφο αυτή θα προσπαθήσουμε να υπολογίσουμε τον εκθέτη ν για σύστημα που έχει ανισοτροπία λόγω $c \neq 1$ και λόγω $J \neq 1$. Θα χρησιμοποιήσουμε τα αριθμητικά δεδομένα που έχουμε για $J=3$, $c=0.8$ και $E=0$. Στον πίνακα 21 δίνουμε τα για $M=11, 13, 15$ και για διάφορες τιμές του W .

Πίνακας 21

W			
28	0.3444	0.3545	0.3604
30	0.295	0.294	0.298

32	0.2511	0.2473	0.2478
----	--------	--------	--------

33	0.2337	0.2296	0.2225
----	--------	--------	--------

Στον πίνακα 22 δίνουμε τις κλίσεις και τον υπολογισμό του ν από διάφορα ζευγάρια τιμών (ν).

Πίνακας 22

					ν
28	30	0.0247	0.0302	0.0312	1.30
5					
30	32	0.0219	0.0233	0.0251	2.32
		5	5		
32	33	0.0174	0.0177	0.0253	0.85
30	33	0.0204	0.0214	0.0251	1.51
		3	7	7	

Η μέση τιμή και η διασπορά μέσης τιμής του ν μας δίνουν έναν υπολογισμό για το $\nu \pm 0.2$. Παρατηρούμε ότι οι τιμές του ν που βρήκαμε έχουν μεγάλη διασπορά. Αυτό οφείλεται ίσως στο γεγονός ότι το σύστημά μας έχει μεγάλη ανισοτροπία επειδή και οι δύο παράμετροι, c και J , είναι διαφορετικοί από τη μονάδα.

Υπολογισμός του ν έχοντας ανισοτροπία μόνο από το c έχει γίνει στην παράγραφο 6.2.1.1, ενώ υπολογισμός όπου $c=1$ και έχοντας ανισοτροπία μόνο από το J έχει γίνει στο μέρος I αυτού του κεφαλαίου. Ο υπολογισμός του ν που είχε γίνει στην παράγραφο

6.1.1.6 είναι υπολογισμός του ν και για το σύστημα που μελετάμε εδώ, με παραμέτρους $c=1$, $J=10$ και $E=0$. Στο σύστημα που μελετάμε εδώ, κανονικοποιούμε τις ενέργειες πάντα ως προς το στοιχείο πίνακα $V=1$ που βρίσκεται στη διεύθυνση διάδοσης του κύματος. Γι'αυτό και το J μπορεί να πάρει τιμές μεγαλύτερες της μονάδας. Στα συστήματα που μελετήσαμε στο μέρος I (κεφάλαιο 6.1) της εργασίας αυτής, κανονικοποιήσαμε τις ενέργειες ως προς το μεγαλύτερο στοιχείο πίνακα μετάβασης. Γι'αυτό και τα J στις δύο κάθετες διευθύνσεις ήταν μονάδα στην παράγραφο 6.1.1.6, ενώ στη διεύθυνση διάδοσης του κύματος ήταν $t=0.1$. Αν όλα τα στοιχεία πίνακα μετάβασης και τα W της παραγράφου 6.1.1.6 τα πολλαπλασιάσουμε με το 10, τα αποτελέσματα της 6.1.1.6 θα μας δώσουν τον υπολογισμό του ν για σύστημα με $c=1$, $J=10$ και $E=0$. Από τα αποτελέσματα αυτά βλέπουμε ότι ο εκθέτης ν είναι ανεξάρτητος και από την λόγω του J ανισοτροπία .

Εφαρμογή σε αγώγιμα πολυμερή και σύγκριση με MFT

Το μοντέλο που μελετήσαμε σ'αυτό το μέρος της εργασίας μας μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή των αγώγιμων πολυμερών. Τα αγώγιμα πολυμερή, όπως πολυασετιλίνη, πολυπυρρόλη κ.α., αποτελούνται από μακρομόρια τα οποία συνδέονται μεταξύ τους με δεσμούς τυχαία κατανεμημένους στον χώρο, δημιουργώντας έτσι ένα δίκτυο. Το κάθε μακρομόριο μπορεί να μην αποτελείται από μία μόνο αλυσίδα στο εσωτερικό του, αλλά από περισσότερες αλυσίδες, οι οποίες φτιάχνουν ένα 'καλώδιο' που είναι το μακρομόριο. Αυτά τα 'καλώδια' είναι που συνδέονται τυχαία μεταξύ τους με δεσμούς στα αγώγιμα πολυμερή. Το δικό μας

μοντέλο είναι ένα απλοποιημένο μοντέλο για πολυμερή, και αναπαριστά το κάθε μακρομόριο με μία μονοδιάστατη αλυσίδα ισχυρής δέσμευσης. Επίσης τοποθετώντας τις αλυσίδες αυτές παράλληλα μεταξύ τους και σε θέσεις που σχηματίζουν απλό κυβικό πλέγμα, η κάθε αλυσίδα μπορεί να συνδεθεί άμεσα μόνο με τις πρώτες γειτονικές της αλυσίδες. Βέβαια οι δεσμοί είναι τυχαία κατανεμημένοι στον χώρο, και σε συνδυασμό με το γεγονός ότι και η επόμενη αλυσίδα είναι συνδεδεμένη με τις αμέσως γειτονικές της κάθε φορά, το αποτέλεσμα είναι να δημιουργείται ένα δίκτυο που πλησιάζει πολύ αυτό των αγώγιμων πολυμερών. Επομένως τα αποτελέσματα και συμπεράσματα που βγάλαμε μελετώντας αυτό το ανισότροπο σύστημα που περιέχει ανισοτροπία λόγω J και c , μπορούμε να τα εφαρμόσουμε για να βγάλουμε συμπεράσματα για σύστημα αγώγιμων πολυμερών.

Το σύστημα αγώγιμων πολυμερών έχει μελετηθεί θεωρητικά και από τους Prigodin και Efeton [Prigodin and Efeton (1993)] με θεωρία πεδίου (Mean Field Theory (MFT)). Παρακάτω θα μιλήσουμε για ομοιότητες και διαφορές του δικού μας μοντέλου με αυτό της MFT, για την αντιστοιχία των παραμέτρων μας, και θα συγκρίνουμε τα αποτελέσματά μας με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της MFT. Το σύστημα αγώγιμων πολυμερών έχει επίσης μελετηθεί με θεωρία σ-μοντέλου [Dupuis N.(1996)]. Θα αναφέρουμε και αυτά τα αποτελέσματα, δείχνοντας έτσι κάποια συμφωνία με τα δικά μας αποτελέσματα, αλλά και με τα αποτελέσματα της MFT.

Το δικό μας μοντέλο είναι όμοιο με το μοντέλο της MFT [Prigodin and Efeton (1993)] με μία μόνο διαφορά· το κάθε μακρομόριο το αναπαριστούν με πολλές συζευγμένες αλυσίδες στην MFT, ενώ στο δικό μας μοντέλο το κάθε μακρομόριο πολυμερούς αναπαρίσταται από μία μονοδιάστατη αλυσίδα. Λόγω της διαφοράς αυτής, η σύγκριση των αποτελεσμάτων μας με την MFT θα πρέπει να είναι μόνο ποιοτική και όχι ποσοτική. Όπως έχουμε εξηγήσει στα παραρτήματα A3 και A4, οι παράμετροι ρ και α που έχουν ορίσει

στην MFT, συνδέονται με τις δικές μας τέσσερις παραμέτρους J , c , E , W μέσω των σχέσεων $\rho=4c$ και α , όπου α και ρ είναι το μήκος εντοπισμού και η πυκνότητα καταστάσεων μιας μονοδιάστατης αλυσίδας που έχει αταξία W και βρίσκεται στην ενέργεια E . Για κάθε κρίσιμο σημείο που έχουμε υπολογίσει και που θέλουμε να τοποθετήσουμε στο διάγραμμα ρ συναρτήσεως του α για να κάνουμε τη σύγκριση, πρέπει να υπολογίσουμε πρώτα τα α και ρ για τα συγκεκριμένα W και E που αναφέρονται σε αυτό το κρίσιμο σημείο.

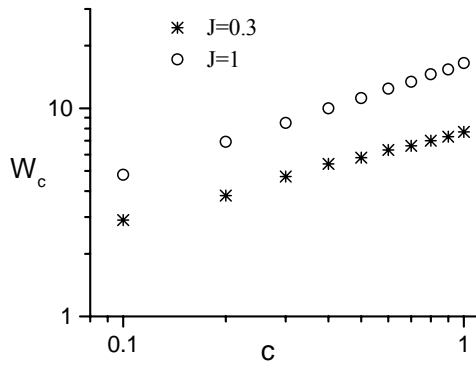
Η σύγκριση των αριθμητικών μας αποτελεσμάτων με την MFT φαίνεται στο σχήμα 1 του παραρτήματος A3. Σ' αυτό το σχήμα η συνεχής γραμμή του ρ συναρτήσεως του α είναι η πρόβλεψη της MFT, ενώ τα σημεία είναι τα δικά μας αποτελέσματα. Η πρώτη σημαντική παρατήρηση εδώ, είναι ότι τα αριθμητικά μας σημεία δεν είναι σκόρπια στο σχήμα, αλλά ακολουθούν μια καμπύλη. Εμείς είχαμε τέσσερις ανεξάρτητες παραμέτρους στο πρόβλημά μας, όπως έχουμε ήδη αναφέρει, τα J , c , E και W , ενώ στην MFT οι παράμετροι είναι μόνο δύο, τα ρ και α . Το γεγονός ότι ο συνδυασμός των τεσσάρων παραμέτρων μας σε δύο παραμέτρους ακολουθεί μια καμπύλη και δεν είναι σκόρπια τα σημεία στο σχήμα, δηλώνει ότι υπάρχει μια quasi-universality (QU), όσον αφορά το συνδυασμό των τεσσάρων παραμέτρων σε δύο. Η άλλη σημαντική παρατήρηση σ' αυτό το σχήμα είναι η μορφή της καμπύλης που ακολουθούν τα σημεία. Στην αρχή είναι φθίνουσα η καμπύλη, φτάνει σε ένα ελάχιστο σημείο (όταν $\alpha \approx 1$) και στη συνέχεια είναι αύξουσα. Στην περιοχή όπου $\alpha \leq 1$ μπορούμε να πούμε ότι υπάρχει καλή ποιοτική συμφωνία (όπως έχουμε αναφέρει δεν μπορούμε να κάνουμε ποσοτική σύγκριση) με την MFT. Στην περιοχή όπου $\alpha > 1$, η οποία αντιστοιχεί σε μεγάλα J και μικρά c , παρατηρούμε ότι η δική μας καμπύλη που σχηματίζεται από τα σημεία είναι αύξουσα, σε διαφωνία με την πρόβλεψη της MFT. Γι' αυτή τη συμπεριφορά της καμπύλης για $\alpha > 1$, ευθύνεται η συνύπαρξη των δύο ρόλων του J , που όπως έχουμε ήδη αναφέρει μιλώντας για τα σχήματα 8 και 9 του A4, στην περιοχή όπου το J είναι μεγάλο και το c μικρό, κερδίζει ο

δεύτερος ρόλος του J και εντοπίζεται το σύστημα ευκολότερα. Πρόσφατα, έγινε μια μελέτη [Duruis N.(1996)] με μη γραμμικό σ -μοντέλο, σε σύστημα όμοιο με αυτό της MFT, αλλά παίρνοντας και το όριο όπου ο αριθμός των αλυσίδων σε κάθε μακρομόριο να είναι μονάδα. Στο όριο αυτό, όπου το σύστημα γίνεται όμοιο με αυτό που μελετήσαμε εμείς, υπάρχει πολύ καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων μας με τα αντίστοιχα αποτελέσματα του σ -μοντέλου, σε όλες τις περιοχές των παραμέτρων.

Ένα άλλο συμπέρασμα που αναφέρεται από τη MFT, είναι ότι για κάποια ενέργεια παραπάνω. Για $J \leq V$ όμως, η σχέση που προτείνουμε εμείς, , είναι κοντά στην πρόβλεψη της MFT αφού τα k και μ είναι και τα δύο κοντά στο 0.5.

Υπολογισμός των k και μ στη σχέση

Σε όλους τους υπολογισμούς που έχουμε κάνει, έχουμε πάρει $V=1$. Καταρχήν θα εξετάσουμε την τιμή που παίρνει ο εκθέτης μ αν το εξαρτάται από το c σαν \sim . Στο σχήμα 6.13 βλέπουμε τη γραμμική εξάρτηση του \log συναρτήσεως του $\log c$ για $J=1$ και $J=0.3$. Η κλίση της κάθε ευθείας μας δίνει έναν υπολογισμό για τον εκθέτη μ . Για $J=1$ υπολογίζουμε $\mu=0.53 \pm 0.03$, ενώ για $J=0.3$ υπολογίζουμε $\mu=0.43 \pm 0.03$. Και οι δύο τιμές του μ που υπολογίσαμε είναι κοντά στο 0.5.



Σχημα 6.13: Η γραμμική εξάρτηση του $\log W_c$ συναρτήσει του $\log c$ για $J=1$ και $J=0.3$, σε ενεργεια $E=0$.

Για τον υπολογισμό του εκθέτη k στην παραπάνω σχέση, βρίσκουμε την κλίση της ευθείας \log συναρτήσεως του $\log J$. Στον παρακάτω πίνακα δίνουμε τις τιμές του k για $c=0.1$ και $J<1$.

J	k	$\pm\Delta$
0.3	2.9	0.2
0.5	3.8	0.2
0.8	4.5	0.2

Η κλίση της ευθείας \log συναρτήσεως $\log J$ δίνει $k=0.45\pm 0.19$. Από τα παραπάνω μπορούμε να πούμε ότι ισχύει \sim μέσα στα όρια του σφάλματος, για $J<1$ και $c=0.1$. Την τιμή του k επιβεβαιώνουν και τα αριθμητικά αποτελέσματα για $c=0.5$ που δίνονται στον παρακάτω πίνακα.

J		$\pm\Delta$
0.1	3.5	0.6
0.06	2.8	0.7
0.02	1.5	0.5

Από τα δεδομένα αυτά, η κλίση του \log συναρτήσεως του $\log J$ είναι 0.53. Εδώ πρέπει να αναφέρουμε ότι προηγούμενες μελέτες που έγιναν με αυτοσυνεπείς [Panagiotides *et al* (1994)] ή με διαταρακτικούς [Dorokhon (1986)] υπολογισμούς χρησιμοποιώντας ανισότροπες Χαμιλτονιανές [Panagiotides *et al* (1994), Dorokhon (1986), Qiming Li *et al* (1989), Economou and Soukoulis (1983)] έδωσαν $\mu=1/2$.

Σύνοψη συμπερασμάτων του ΜΕΡΟΥΣ II

Στο ΜΕΡΟΣ II μελετήσαμε αριθμητικά τη μετάβαση μετάλλου-μονωτή σε σύστημα τυχαία συζευγμένων αλυσίδων και συγκρίναμε τα αποτελέσματά μας με τα αποτελέσματα μιας θεωρίας πεδίου [Prigodin and Efetov (1993)]. Τα βασικά συμπεράσματα της μελέτης αυτής συνοψίζονται παρακάτω :

—Οι τέσσερις ανεξάρτητες παράμετροι W , c , J , E μπορούν να συνδυαστούν σε δύο παραμέτρους $\rho=4c$ και \dots .

—Ο διπλός ρόλος του J ευθύνεται για το ότι το σχήμα της καμπύλης μετάβασης μετάλλου-μονωτή είναι διαφορετικό στα αποτελέσματά μας συγκρίνοντάς τα με τη θεωρία πεδίου.

—Για $J \leq V$ υπερισχύει ο ρόλος του J που διευκολύνει τη διάδοση του κύματος, λόγω του τρισδιάστατου χαρακτήρα που δίνει στο σύστημα.

Για $J \gg V$ και μικρά c κυριαρχεί ο ρόλος του J που ευνοεί τον εντοπισμό λόγω πρόσθετης τυχαιότητας που δίνει στο σύστημα.

—Η πρόταση ότι το \dots είναι συνάρτηση του $J \cdot c$ (όπως προτάθηκε από τη θεωρία πεδίου) δεν ισχύει για όλες τις τιμές του J και του c .

Αναφορές

- Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C and Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- Abrikosov A A 1994 *Phys. Rev. B* **50** 1415
- Abrikosov A A and Ryzhkin I A 1978 *Adv. Phys.* **27** 147
- Altshuler B L and Aronov A G 1979a *Sov. Phys.-JETP* **50** 968
- _____ 1979b *Solid State Commun.* **39** 115
- _____ 1985 *Electron-Electron Interactions in Disordered Systems* ed A L Efros and M Pollak (Amsterdam: Elsevier) p 1
- Altshuler B L, Aronov A G and Lee P A 1980 *Phys. Rev. Lett.* **44** 1288
- Anderson P W 1958 *Phys. Rev.* **109** 1492
- _____ 1981 *Phys. Rev. B* **23** 4828
- Anderson P W, Thouless D J, Abrahams E and Fisher D S 1980 *Phys. Rev. B* **22** 3519
- Apel W and Rice T M 1983 *J. Phys. C* **16** L1151
- Belitz D and Kirkpatrick T R 1989a *Nucl. Phys.* **316B** 509
- _____ 1989b *Phys. Rev. Lett.* **63** 1296
- _____ 1991 *Localisation 1990* ed K A Benedict and J T Chalker (Bristol: Institute of Physics) p 41
- Bergman G 1982a *Phys. Rev. Lett.* **49** 162
- _____ 1982b *Phys. Rev. Lett.* **48** 1046
- _____ 1982c *Phys. Rev. B* **25** 2937
- _____ 1984 *Phys. Rep.* **107** 1
- Bhatt R N et. al. 1985 *Phys. Rev. B* **32** 569
- Bhatt R N, Paalanen M A and Sachdev S 1988 *J. Physique* **49** 1179
- Büttiker M, Imry Y, Landauer R and Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- Castellani C, Di Castro C and Lee P A 1984 *Phys. Rev. B* **30** 527
- Chu Q Z and Zhang Z Q 1993 *Phys. Rev. B* **48** 10761
- Cota E, José J V and Azbel M Ya 1985 *Phys. Rev. B* **32** 6187
- Delyon F, Simon B and Souillard B 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 2187
- Dorokhov O N 1986 *J.E.T.P. Lett.* **43** 126
- Dupuis N 1996 Preprint
- Economou E N 1983 *Green's Functions in Quantum Physics* (Berlin: Springer)
- Economou E N and Soukoulis C M 1981a *Phys. Rev. Lett.* **47** 618
- _____ 1981 *Phys. Rev. Lett.* **46** 618
- _____ 1981b *Phys. Rev. Lett.* **47** 972
- _____ 1983 *Phys. Rev. B* **28** 1093
- Economou E N, Soukoulis C M, Zdetsis A D 1984 *Phys. Rev. B* **30** 1686
- _____ 1985a *Phys. Rev. B* **31** 6483
- Edwards J T and Thouless D J 1972 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **5** 807
- Efetov 1983 *Adv. Phys.* **32** 53
- Finkelstein A M 1983a *Sov. Phys. - JETP* **57** 97
- _____ 1983b *JETP Lett.* **37** 517
- _____ 1984a *JETP Lett.* **86** 367
- _____ 1984b *Z. Phys. B* **56** 189
- Fisher D S and Lee P A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 685
- Fukuyama H 1980 *J. Phys. Soc. Japan* **48** 2169
- Gorkov L P, Larkin A I and Khmel'nitskii D E 1979 *JETP Lett.* **30** 228
- Götze W 1981 *Phil. Mag.* **43** 219
- _____ 1985 *Localisation Interaction and Transport Phenomena* (Springer Series in Solid State Science **61**) ed B Kramer, G Bergmann and Y Bruynseraede (Berlin: Springer) p 62
- Hikami 1981 *Phys. Rev. B* **24** 2671
- Hikami S, Larkin A I and Nagaoka Y 1980 *Prog. Theor. Phys.* **63** 707
- Ishiguro T, Kaneko H, Nogami Y, Ishimoto H, Nishiyama H, Tsukamoto J, Takahashi A, Yamaura M, Hagiwara T and Sato K 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 660
- Iye Y 1992 in *Physical Properties of High T_c Superconductors* edited by D M Ginzberg (World Scientific, Singapore)
- Javadi H H S, Chakraborty A, Li C, Theophilou N, Swanson D B, MacDiarmid A G and Epstein A J 1991 *Phys. Rev. B* **43** 2183

Katsanos D, Evangelou S N and Lambert C 1997 *preprint*
Katsumoto S 1991 *Localisation 1990* ed K A Benedict and J T Chalker (Bristol: Institute of Physics) p 17
Kaveh M and Mott N F 1981 *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** 259
Kirkpatrick T R and Belitz D 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5227
_____ 1990a *Phys. Rev B* **41** 11082
_____ 1990b *J. Phys.: Condens. Matter* **2** 5259
Kotliar G *et al* 1991 *Europhys. Lett.* **15** 655
Kramer B and Mac Kinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
Kramer B and Schön G (ed) 1990 *Physica A* **167**
Landauer R 1957 *IBM J. Res. Dev.* **1** 223
Landauer R 1970 *Phil. Mag.* **21** 863
Langreth D C and Abrahams E 1981 *Phys. Rev. B* **31** 2978
Leo J L and Movaghar B 1988 *Phys. Rev. B* **38** 8061
Licciardello D C and Thouless D J 1975a *Phys. Rev. Lett.* **35** 1475
_____ 1975b *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8** 4157
MacKinnon A 1980 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **13** L1031
_____ 1985a *Z. Phys. B* **59** 385
_____ 1985b *Localisation Interaction and Transport Phenomena* (Springer Series in Solid State Science **61**) ed B Kramer, G Bergmann and Y Bruynseraede (Berlin: Springer) p 90
MacKinnon A and Kramer B 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1546
_____ 1983a *Z. Phys. B* **53** 1
Markos P and Evangelou S N 1996 *Ann. Phys.* **5** 526
Milovanovic M, Sachdev S and Bhatt R N 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 82
Mott N F 1968 *J. Non-Cryst. Solids* **1** 1
Mott N F and Twose W D 1961 *Adv. Phys.* **10** 107
Nogami Y, Kaneko H, Ito H, Ishiguro T, Sasaki T, Toyota N, Takahashi A and Tsukamoto J 1991 *Phys. Rev. B* **43** 11829
Oseledec V I 1968 *Trans. Moscow Math. Soc.* **19** 197
Panagiotides N, Evangelou S N and Theodorou G 1994 *Phys. Rev. B* **49** 14122
Pichard J-L 1984 *PhD Thesis* Université de Paris Orsay
Pichard J-L and André G 1986 *Europhys. Lett.* **2** 477
Pichard J-L and Sarma G 1981a *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** L127
_____ 1981b *J. Phys. C: Solid State Phys.* **14** L617
Prigodin V N and Efetov K B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 2932
Qiming Li, Soucoulis C M, Economou E N and Grest G S 1989 *Phys. Rev. B* **40** 2825
Raimondi R, Castellani C and Di Castro C 1990 *Phys. Rev. B* **42** 4724
Rojo A G and Levin K 1993 *Phys. Rev. B* **48** 16861
Schreiber M 1985 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **18** 2493
Sokoloff J B 1985 *Phys. Rep.* **126** 189
Soukoulis C M and Economou E N 1993 *Encyclopedia of Applied Physics* **5** 549
Soukoulis C M, Jose J, Economou E N and Sheng Ping 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 764
Timp G, Behringer R, Dunningham J E, Howard R E 1989 *Phys. Rev. Lett.* **63** 2268
Thomas G A 1986 *Localisation and Interactions in Disordered and Doped Semiconductors* ed D M Finlayson (Edinburgh: SUSSP) p 172
Thomas G A and Paalanen M A 1985 *Localization Interaction and Transport Phenomena* (Springer Series in Solid State Science **61**) ed B Kramer, G Bergmann and Y Bruynseraede (Berlin: Springer) p 77
Thouless D J 1974 *Phys. Rep.* **13** 93
_____ 1979 *III-condensed Matter* ed G Toulouse and R Balian (Amsterdam: North-Holland)
_____ 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 92
Vollhardt and Wölfle P 1980a *Phys. Rev. B* **22** 4666
_____ 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 699
_____ 1992 in *Electronic Phase Transitions*, edited by W. Hanke and Yu. V. Kopayev (Elsevier, New York) Chap. 1, p.38
Wegner F J 1976 *Z. Phys. B* **25** 327
_____ 1979a *Z. Phys. B* **35** 207
_____ 1979b *Phys. Rev B* 783
_____ 1985 *Localisation Interaction and Transport Phenomena* (Springer Series in Solid State Science **61**) ed B Kramer, G Bergmann and Y Bruynseraede (Berlin: Springer) p 99

Wölfle P and Bhatt R N 1984 *Phys. Rev. B* **30** 3542
Xiong S J and Evangelou S N 1995 *Phys. Rev. B* **52** R13079
Xiong S J, Chen Yom and Evangelou S N 1996 *Phys. Rev. B* **76** 3079
Xue W, Sheng P, Chu Q J and Zhang Z Q 1989 *Phys. Rev. B* **63** 2837
_____ 1990 *Phys. Rev. B* **42** 4613
Zdetsis A D, Soukoulis C M, Economou E N, Grest G S 1985 *Phys. Rev. B* **32** 7811

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α1
Phys.Rev.Lett. **76**, 3614, (1996)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α2
Phys.Rev.B **56**, 12221, (1997)

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α3

J.Phys.: Condens. Matter **8** (1996) L605-L610

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α4