

ЧАСТИЦА В СЛУЧАЙНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ. НОВАЯ ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВАЯ ФОРМУЛИРОВКА.

А.Г.Аронов, А.С.Иоселевич

Предложено новое представление функции Грина уравнения Шредингера в виде функционального интеграла. В этом представлении задача об электроны в случайном потенциале сводится к теоретико-полевой без привлечения метода реплик или суперсимметрии.

Проблема андерсоновской локализации не может быть решена методами теории возмущений (ТВ) ¹. Поэтому были предприняты попытки сформулировать задачу о движении электрона в случайном потенциале на языке теории поля, допускающем выход за рамки ТВ ²⁻⁴. В этих работах электронная функция Грина (ФГ) представлялась в виде функционального интеграла по некоторой полевой переменной, причем сначала выполнялось усреднение по случайным внешним потенциалам. В результате такого усреднения возникает эффективное нелинейное самодействие электронного поля и задача может решаться полевыми методами.

ФГ электрона в случайном потенциале $U(\mathbf{r})$ в энергетическом представлении записывалась в виде

$$G_{E,A}^{R,A}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \pm i Z_{R,A}^{-1}(E) \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \psi(\mathbf{r}_2) \bar{\psi}(\mathbf{r}_1) \exp\{\pm i \int d\mathbf{r} \bar{\psi}(E - \hat{H} \pm i\delta)\psi\}, \quad (1)$$

$$Z_{R,A}(E) = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \exp\{\pm i \int d\mathbf{r} \bar{\psi}(E - \hat{H} \pm i\delta)\psi\}, \quad (2)$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 + U(\mathbf{r})$, \hat{H}_0 — гамильтониан свободного электрона.

Если бы нормировочный знаменатель $Z_{R,A}$ не зависел от U , то усреднение ФГ (1) (или произведения разных ФГ) в гауссовом случае проводилось бы тривиально. Однако если $\psi(\mathbf{r})$ есть обычная однокомпонентная волновая функция, то

$$Z_{R,A}(E) \propto \exp\{-\text{Tr} \ln(-i(E - \hat{H} \pm i\delta))\} \propto \prod_{\lambda} (E - \epsilon_{\lambda} \pm i\delta)^{-1}, \quad (3)$$

где ϵ_{λ} — собственные значения \hat{H} , т. е. $Z_{R,A}$ зависит от вида потенциала. Для устранения этой зависимости в ² было предложено использовать метод реплик, в котором $\psi(\mathbf{r})$ считается N -компонентным вектором, а в конечном выражении $N \rightarrow 0$. В последнее время, однако, появились работы, показывающие, что вне рамок ТВ метод реплик может приводить к неправильным результатам ¹⁾.

Другой способ устранения знаменателя Z был предложен в ⁴ (метод суперсимметрии). Этот метод, в отличие от метода реплик, является математически корректным. Однако введение грасмановых переменных в задаче без взаимодействия, где фермиевская статистика электронов не проявляется, кажется физически неоправданным.

В настоящей работе мы предлагаем новый метод представления полевого интеграла для ФГ, в котором не вводится никаких дополнительных компонент поля и ψ имеет ясный физический смысл однокомпонентной волновой функции, а знаменатель $Z_{R,A} \equiv 1$.

Введение нормировочного знаменателя в теории поля соответствует сокращению несвязных вакуумных диаграмм. Однако ясно, что в одночастичной задаче (описываемой обычным уравнением Шредингера) никакое, даже виртуальное, рождение пар невозможно. Поэтому при корректной записи функционального интеграла необходимости в нормировочном знаменателе не возникает. Заметим, что по той же причине и в фейнмановском интеграле по траекториям ⁵ также нет нетривиального нормировочного знаменателя.

¹⁾ Мы благодарны К.Б.Ефетову за сообщение об этих неопубликованных работах.

Запишем ФГ во временном представлении в виде функционального интеграла по зависящим от времени волновым функциям $\psi(\mathbf{r}, t)$:

$$G^{R, A}(x_2, x_1) = \pm Z_{R, A}^{-1} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \psi(x_2) \psi^*(x_1) \exp(\pm i \int dx \psi^* \hat{L}^{R, A} \psi), \quad (4)$$

$$Z_{R, A} = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \exp(\pm i \int dx \psi^* \hat{L}^{R, A} \psi), \quad (5)$$

$$\hat{L}^{R, A} = i \partial_t - \hat{H} \pm i \delta; \quad x \equiv (\mathbf{r}, t). \quad (6)$$

Для того, чтобы функциональные интегралы (4), (5) имели вполне определенный смысл (см. 6), их нужно понимать, как пределы конечномерных интегралов, возникающих при введении дискретного времени $t_n = n\Delta$, $n = -N, \dots, N$. При этом интегрирование по времени t заменяется на суммирование по n , а операторы $\hat{L}^{R, A}$ являются пределами конечномерных матриц

$$\tilde{L}_{nn'}^{R, A} = \pm i(\delta_{n'n} - \delta_{n'n+1}) - \Delta(\hat{H}_{n+1/2} \mp i\delta) \delta_{n'n+1}. \quad (7)$$

Эти матрицы являются треугольными, причем $\tilde{L}^{R+} = \tilde{L}^A$, и у \tilde{L}^R равны нулю все элементы, расположенные над диагональю, а у \tilde{L}^A — под ней. Поэтому очевидно (и это можно показать строго), что L^R генерирует запаздывающую, а L^A — опережающую ФГ:

$$\tilde{G}^{R, A} = (\tilde{L}^{R, A})^{-1}; \quad G^{R, A} = \lim_{\Delta \rightarrow 0, N \rightarrow \infty} \tilde{G}^{R, A}. \quad (8)$$

Детерминант треугольной матрицы равен произведению ее диагональных элементов, поэтому $\det(\tilde{L}^{R, A}) = (\pm i)^{2N+1} \neq 0$. Этим условием обеспечивается существование и единственность обратных матриц (8), необходимое для того, чтобы представление (4) имело смысл. Если определить меру в интегралах (4), (5), как

$$\mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* \equiv \prod_{n=-N}^N \pi^{-1} D \operatorname{Re} \psi(\mathbf{r}, t_n) D \operatorname{Im} \psi(\mathbf{r}, t_n), \quad (9)$$

то

$$\tilde{Z}_{R, A} = \det(\mp i L^{R, A}) = 1, \quad Z_{R, A} = \lim_{\Delta \rightarrow 0, N \rightarrow \infty} \tilde{Z}_{R, A} = 1. \quad (10)$$

Таким образом, мы доказали, что выражение (4) можно записывать вообще без нормировочного знаменателя. Это означает, что в представлении (4) гауссово усреднение по U проводится тривиально.

Все сказанное выше справедливо для гамильтониана $\hat{H}(t)$, произвольным образом зависящего от времени. В случае статического \hat{H} , записывая (4), (5) в энергетическом представлении, получим:

$$G_E^{R, A}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = \mp i \int D\psi D\psi^* \psi_E(\mathbf{r}_2) \psi_E^*(\mathbf{r}_1) \exp\{\pm i \int dE' d\mathbf{r} \psi_{E'}^*(E' - \hat{H} \pm i\delta) \psi_{E'}\}. \quad (11)$$

Условие (10) в энергетическом представлении имеет вид

$$1 = Z_{R, A} \propto \prod_{E'} Z_{R, A}(E') = \prod_{\lambda} \prod_{E'} (E' - \epsilon_{\lambda} \pm i\delta)^{-1}. \quad (12)$$

Пользуясь тем, что все особенности выражения (12) лежат в одной полуплоскости комплексного E' , можно убедиться в том, что последнее произведение действительно не зависит от ϵ_{λ} . Для строгого доказательства этого факта нужно преобразовать (10) к энергетическому представлению при конечных Δ и N и перейти к пределу только после вычисления произведения. Согласно (12) $Z_{R, A}^{-1}(E) \propto \prod_{E' \neq E} Z_{R, A}(E')$, откуда, используя (2),

легко доказать тождественность определений (1) и (11).

Таким образом, для того, чтобы избавиться от нетривиального нормировочного множителя необходимо вместо функционального интегрирования по $\psi(\mathbf{r})$ — зависящим только от \mathbf{r} , ввести интегрирование по $\psi(\mathbf{r}, t)$ или по $\psi_E(\mathbf{r})$ т. е. по волновым функциям, отвечающим всем энергиям.

Производящий функционал, генерирующий любые произведения G^R и G^A , усредненные по гауссову примесному потенциалу, имеет вид

$$Z(\rho_R, \rho_A) = \int \mathcal{D} U(\hat{\Delta} \psi) \exp \left\{ i \int dx (\psi_R^* \hat{L}^R \psi_R - \psi_A^* \hat{L}^A \psi_A + \rho_R^* \psi_R + \psi_R^* \rho_R - \rho_A^* \psi_A - \psi_A^* \rho_A) - \frac{1}{2} \int dt dr' U(\mathbf{r}) \gamma^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \right\}, \quad (13)$$

где $\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — коррелятор случайных потенциалов, а интегрирование ведется независимо по $\psi_R(x)$ и $\psi_A(x)$; $(D\psi) \equiv D\psi_R D\psi_R^* D\psi_A D\psi_A^*$. Выполняя интегрирование по U и используя (5), (10), получим

$$Z(\rho_R, \rho_A) = \int \mathcal{D} \psi \exp \{ i S_{eff} + i \int dx [(\bar{\rho} \psi) + (\bar{\psi} \rho)] \}, \quad (14)$$

$$S_{eff} = \int dx (\bar{\psi} \hat{L}_0 \psi) + \frac{i}{2} \iint dx dx' (\bar{\psi} \psi)_x \gamma(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (\bar{\psi} \psi)_{x'}, \quad (15)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_R \\ \psi_A \end{pmatrix}, \quad \rho = \begin{pmatrix} \rho_R \\ \rho_A \end{pmatrix}, \quad \bar{\psi} = (\psi_R^*, -\psi_A^*), \quad \bar{\rho} = (\rho_R^*, -\rho_A^*), \quad (16)$$

$$\hat{L}_0 = \begin{pmatrix} \hat{L}_0^R & 0 \\ 0 & \hat{L}_0^A \end{pmatrix}, \quad (17)$$

где $\hat{L}_0^{R,A}$ отвечают $U = 0$. Двухчастичная ФГ, связанная с коррелятором плотность-плотность, выражается через производящий функционал следующим образом

$$\langle G^R(x_2 x_1) G^A(x'_2 x'_1) \rangle = \frac{\delta^4 Z(\rho_R, \rho_A)}{\delta \rho_A(x'_1) \delta \rho_A^*(x'_2) \delta \rho_R(x_2) \delta \rho_R(x_1)} \Big|_{\rho=0} \quad (18)$$

Аналогично могут быть записаны и формулы для более сложных корреляторов.

Выражение (15), полученное для случайного статического потенциала, находится в прямом соответствии с выражением, полученным в ⁷ для случайного потенциала, зависящего от времени (фононов). Наличие в (15) корреляции волновых функций при всех временах (всех энергиях) есть следствие статичности потенциала и отражает тот факт, что в выражение для ФГ уравнения Шредингера при данной энергии входят собственные функции, отвечающие всем энергиям.

В интеграле (14) с помощью известного преобразования Хаббарда — Стратоновича можно, подобно ^{2, 3}, ввести коллективные переменные (Q -матрицы), однако в нашем случае Q -матрицы могут описывать корреляцию волновых функций при различных энергиях: $Q_{EE'} \propto \langle \psi_E \bar{\psi}_{E'} \rangle$.

Авторы благодарны Б.Л.Альтшулеру за полезные обсуждения.

Литература

1. Anderson P.W. Phys. Rev., 1958, 102, 1008.
2. Wegner F. Z. Physik., 1979, B35, 207.
3. Ефетов К.Б., Ларкин А.И., Хмельницкий Д.Е. ЖЭТФ, 1980, 79, 1920.
4. Ефетов К.Б. ЖЭТФ, 1982, 83, 833.
5. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. М.: Мир, 1968.
6. Васильев А.Н. Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л.: изд. ЛГУ, 1976.
7. Иселевич А.С. ЖЭТФ, 1981, 81, 1508.