

БУРДЕЙНИЙ ВОЛОДИМИР

Вінницький національний технічний університет

<https://orcid.org/0009-0001-1109-0262>e-mail: brdnvldmr@ukrnet.com**КАСІЯНЕНКО ВАСИЛЬ**

Вінницький національний технічний університет

<https://orcid.org/0009-0003-0196-8929>e-mail: cassic1955@gmail.com

ФУНКЦІЯ ГРІНА ПСЕВДОСПІН-1 СИСТЕМИ ПРИ РОЗСІЯННІ НА ХАОТИЧНОМУ МІЖЗОННОМУ ПОТЕНЦІАЛІ

З відкриттям графену і графеноподібних систем фізика конденсованого стану не тільки одержала принципово новий предмет дослідження з багатообіцяючими, як показують успіхи сучасної нанотехнології, можливостями застосувань в нанoeлектроніці, але і отримала потужний імпульс для пошуків інших об'єктів з не менш екзотичними властивостями. Ключовим у цих пошуках виявилися особливості спектру та хвильових функцій згаданих систем. Щодо спектру, то в околі критичних точок зони Бріллюєна закон дисперсії лінійно залежить від квазіімпульсу, а екіенергетичні поверхні мають форму двох конусів зі спільною вершиною.. Хвильові функції відзначаються двокомпонентною спірною структурою властивою частинкам зі спіном $\frac{1}{2}$.

Природним розширенням номенклатури таких, так званих псевдо спінових, систем стали об'єкти зі псевдоспіном більшим, ніж $\frac{1}{2}$. Хоча в теоретичному контексті досліджуються системи з довільним

псевдо спіном, з огляду на експериментальну реалізацію більш глибокі дослідження стосуються систем з псевдо спіном рівним 1, які створюються на базі оптичних решіток. моделюються макроскопічними фотонними кристалами, ультра охолодженими атомами.

З огляду на реальні процеси синтезу псевдо спіні об'єкти, як і будь-які інші конденсовані системи, не позбавлені структурних неоднорідностей, тобто дефектів, багатих за своєю природою, походженням. структурою чи іншими морфологічними особливостями. Наявність дефектів не в останню чергу позначається на енергетичному спектрі системи. призводячи до появи локальних. віртуальних енергетичних станів, розсіяння квазічастинок та інших ефектів.

Стосовно енергетичного спектру достатньо інформативним є метод функцій Гріна, які і є основним об'єктом дослідження в даній роботі. Вплив дефектів на властивості псевдоспін-1 систем, зокрема на локалізацію та тунелювання квазічастинок, вивчався в роботах багатьма авторами, які в якості таких неоднорідностей розглядали ряд паралельних одномірних потенціальних бар'єрів з рівномірно розподіленими хаотичними ширинами чи висотами.

Дана робота відрізняється від вищезгаданих тим, що хаотичний потенціал викликає переходи між дисперсійними зонами псевдоспін-1 системи, в той час як вклад плоскої зони, наявності якої встановлена в багатьох джерелах, проявляється у вищих наближень теорії збурень. Стосовно випадкового поля, то на відміну від вже згаданих моделей, тут не постулюється аналітична форма потенціалу. а враховуються лише його досить загальні і не обтяжуючі статистичні властивості.

В цій роботі в першу чергу встановлюється резольвентна функція Гріна, яка для ідеальної, а також неупорядкованої псевдоспін -1 системи, має вигляд матриці третього порядку. Після цього записується ряд теорії збурень у вигляді розкладу по степенях випадкового поля, який усереднюється по його реалізаціях. Для усередненої функції Гріна записано рівняння Дайсона. наближений розв'язок якого встановлений у другому порядку теорії збурень, що еквівалентно наближенню Борна. Аналіз власної енергетичної частини показує, що в границі, коли енергія прямує до нуля власна енергетична частина має сингулярність, пов'язану з плоскою без дисперсійною енергетичною зоною. Виділення сингулярної частини функції Гріна в комбінації з рівнянням Дайсона дозволило знайти перенормовану власну енергію, яка виражається в термінах бінарного корелятора випадкового поля. Після обчислення перенормованої власної енергії було встановлено вище наближення функції Гріна.

Енергетичний спектр квазічастинок знаходиться як полюсна частина функції Гріна. Показано, що має місце розщеплення зон з появою енергетичної щільності флуктуаційної природи. Ширина забороненої зони виявляється пропорційною парній кореляційній функції. Зазнає модифікація також бездисперсійна у випадку ідеальної системи енергетична зона. Внаслідок розсіяння на флуктуаціях випадкового поля власна енергія має уявну частину, що приводить до згасання елементарних збуджень неперервного спектру. Слід відзначити, що всі поправки до функції Гріна виражаються в термінах бінарної кореляційної функції випадкового поля, яка априорі невідома.

Ключові слова: псевдоспінові системи, резольвентна функція Гріна, теорія збурень, власна енергетична частина, перенормування. дисперсійне рівняння, енергетичний спектр.

BURDEYNNY VOLODYMYR**KASIYANENKO VASUL**

Vinnitsia National Technical University

GREEN'S FUNCTION OF PSEUDOSPIN-1 SYSTEMS UNDER SCATTERING BY A CHAOTIC INTERBAND POTENTIAL

With the discovery of graphene and graphene-like systems, condensed matter physics not only found a fundamentally new subject of research with very promising, as it has been demonstrated by the modern nanotechnology amazing successes, perspectives of applications in nanoelectronics, but also received a powerful impetus for searching of other objects with no less exclusive properties. It is well-known that decisive features which determine the main peculiarities of any systems reduce to the energetic spectra and wave functions structure. It is why investigations of spectrum and wave function turn out to be key for searching such exotic objects. Concerning the spectrum of graphene-like systems its

characteristic feature is that in the vicinity of Brillouin zone critical points the dispersion law shows linear dependence on the wave vector. As far as the equienergy surfaces they have the form of two cones with a common vertex localized in the critical points. Correspondent wave functions manifest two component form similar to the spinor structure inherent to the particles with spin $\frac{1}{2}$.

Due to the wave functions structure such objects were named as the pseudospin $\frac{1}{2}$ systems. It is quite natural to expand the nomenclature of pseudospin systems by considering ones with the pseudospin greater than $\frac{1}{2}$. Although in the theoretical context enough attention is paid to the systems with an arbitrary pseudospin equal to N , in view of the experimental and technological opportunities more profound studies are focused on the pseudospin-1 objects because of their wide area of realizations beginning from the optical lattices and ultra-cooled atoms ending by photonic crystals with some special values of dielectric and magnetic permittivity in frequency function etc. However, taking in account real processes of synthesis, one can conclude that the pseudo-spin objects, like any other condensed matter's systems, are inevitable submitted to appearance of structural inhomogeneities, i.e. defects which are rich in their nature, origin, structure or other morphological features. The presence of defects, not least of all, affects the energy spectrum of the system, leading to the emergence of local and virtual energy states and also causes scattering of quasiparticles and other effects.

That is why this work has as its main purpose the investigation of chaotic potential impact on the energy spectrum of the pseudospin-1 system. Concerning this problem the Green's function method admits to be informative enough as really powerful approach with well elaborated mathematical procedures. Due to the lot of experimental results the effects of inhomogeneities on the properties of pseudospin-1 systems, for example on the localization and tunneling of quasiparticles, have been studied in the works of many authors. As a rule they only considered as defects a number of parallel one-dimensional potential barriers with uniformly distributed chaotic widths or heights while this work differs from above mentioned by more general suggestions about the potential related to defects. Here was assumed that the chaotic potential causes transitions between dispersion zones of pseudospin-1 system, while the contribution of the undispersed flat zone, which has been established in many early studies, is manifested in higher approximations of perturbation theory. Regarding the random field, unlike the already discussed models, an analytical form of the potential is not postulated here. As far as its peculiarities only some general statistical properties have been accepted in order to consider the energetic spectrum problem. Then resolvent Green's function has been introduced. Due to the Hamilton's operator structure, appropriated to the pseudospin-1 systems, Green function has a form of third-order matrix. For some chaotic field realization Green function can be written in terms of the perturbation theory as the series in powers of the potential. By averaging procedure the operator of the proper energy has been introduced and was determined in the Born's approximation. Analysis of the self-energy part shows that it turns out singular when the energy tends to zero. It is this singularity that manifests the influence of the flat no dispersive zone. Isolating the singular part in the seed Green's function allows to sum the perturbation theory series and find the renormalized self-energy part whose substitution into the Dyson's equation permits to find the final result for the Green's function.

The energy spectrum of quasiparticles is found as the pole part of the Green's function. It is shown that there is a splitting of the bands with the appearance of an energy gap of a fluctuation nature. The width of the forbidden band is proportional to the pair correlation function of random potential. The energy band, which is dispersionless in the case of an ideal system, also undergoes modification. Beside it the energy states of continuous spectrum suffer attenuation due to scattering on fluctuations of a chaotic field. It should be pointed out that all corrections to the Green's function are expressed in terms of the pair correlation function of the random field, which is a priori unknown.

Keywords: pseudospin systems, Green's resolvent function, perturbation theory, self-energy part, renormalization, dispersion equation, energy spectrum

Стаття надійшла до редакції / Received 23.04.2025

Прийнята до друку / Accepted 26.05.2025

Вступ

Відкриття графену [1], розробка технологій його надійно відтворюваного синтезу із заданими і прогнозованими параметрами надали фізиці конденсованого стану новий об'єкт досліджень з багато в чому унікальними властивостями, що в деталях описано в роботі [2], де також приведена обширна бібліографія, яка стосується не тільки графену, а і значного кола суміжних проблем.

В значній мірі електрофізичні властивості графену і йому подібних систем пов'язані із структурою енергетичного спектру та хвильових функцій, які мають двокомпонентну спірну будову аналогічну хвильовим функціям частинок з пів цілим спіном. Оскільки двокомпонентна структура хвильових функцій не має нічого спільного зі спіном як таким, то відповідні системи мають назву псевдо спінових.

Деякі приклади узагальнення поняття псевдо спін системи представлено в роботі [3,4], в якій досліджуються властивості псевдо спін моделі з довільним півцілим і цілим значенням псевдоспіна. Авторами використовується модель сильного зв'язку з переходами між найближчими сусідами в накладених одна на одну правильних трикутних решітках. Встановлено, що у довгохвильовому наближенні спектр описується двовірним рівнянням Дірака. Показано, що для цілочислених значень спіну в спектрі з'являється плоска без дисперсійна зона, яка суттєво змінює якісні властивості системи в порівнянні з випадком пів цілого, зокрема рівного $\frac{1}{2}$, спіну. Це стосується фізично спостережуваних властивостей, таких як густина станів, оптичне поглинання, Клейнівське тунелювання. В роботі вивчаються числа Черні, а також виродження нульового рівня Ландау. Крім цього виявляється, що зміна способу укладання решіток можна суттєво змінювати топологічні властивості, які не мають аналогії з багатолістовим графеном.

З поміж систем з псевдо спіном, який перевищує $\frac{1}{2}$, найбільший інтерес викликають псевдоспін-1 об'єкти. Це в значній мірі пов'язано з тим, що, як відзначають автори роботи [5], псевдо спін-1 системи з прогнозованими і відтворюваними властивостями допускають штучне створення і моделювання шляхом вибору складових компонент, параметри яких піддаються змінам у широких межах. Приклад такого підходу представлено в роботі [6], в якій показано, що в деяких фотонних кристалах, а саме в таких, в яких при певній частоті електрична і магнітна проникності дорівнюють нулю, а тому в околі цієї частоти рівняння Максвелла мають розв'язки, структура яких аналогічна структурі розв'язків рівняння Дірака, яке описує електронну псевдоспін- систему. Тут же підтверджується можливість контрольованим чином впливати на спектр шляхом зміни масштабу решітки. Авторами показано суттєві відмінності Клейнівського тунелювання і самофокусування одномірним потенціальним бар'єром, які мають місце в псевдоспін -1 і -1/2 фотонних решітках, а також звертається увага на доцільність використання фотонних кристалів для

моделювання процесів на мікроскопічному рівні. Ці і інші результати актуалізують значну кількість досліджень присвячених саме синтезу і створенню таких матеріалів з особливим акцентом на керуваності процесів, відтворюваності результатів.

Штучно створені системи мають не тільки самостійне значення, а також дозволяють адекватне моделювання властивостей псевдо спінових систем на атомно-молекулярному рівні. В більшості випадків шаблоном для створення таких систем служить решітка Лайба (Lieb), а конкретною реалізацією є імплантатія в таку оптичну решітку холодних бозонних атомів; формування оптичної решітки періодичною системою хвилеводів. Що ж до псевдоспін-1 електронної структури, то про їх створення повідомляється авторами робіт [7-9]. Спектральні властивості і явища перенесення в електронних решітках Лайба мезоскопічних розмірів як у випадку крайових умов Борна-Кармана, так і Діріхле з особливим акцентом на формуванні бездисперсійної енергетичної зони і її проявах детально досліджено в роботі [10].

Хоча значна увага надається синтезу систем ідеальних з точки зору кристалічної структури, їх енергетичному спектру і реакції на такі зовнішні чинники як електромагнітні поля, лазерне випромінювання чи ультразвукові хвилі, в останню декаду посилюється інтерес до вивчення ролі дефектів і їх впливу на фізичні властивості псевдоспін-1 об'єктів. Щодо прояву структурних дефектів, то в першу чергу дослідження фокусуються на явищах андерсонівської локалізації, тунелювання та порівняння із закономірностями цих ефектів у псевдо спін-1 і псевдо спін-1/2 системах. В усіх випадках в якості дефектів розглядаються [11] одиночний прямокутний потенціальний бар'єр або сукупність таких паралельних бар'єрів з хаотично розподіленою висотою і товщиною [5,6, 11-14]. В згаданих вище роботах оператор, відповідальний за розсіювання, є не тільки одномірним з порівняно простою залежністю від координат, а також має діагональний вигляд у представленні власних функцій оператора псевдоспина-1. У зв'язку з цим може мати певний зміст дослідження не впорядкованої псевдо спін-1 системи з недіагональним хаотичним потенціалом. Одна із моделей такої не впорядкованої системи розглядається в даній роботі.

1. Модель псевдо спін-1 системи з недіагональним безпорядком

Дослідження енергетичного спектру псевдо спін-1 систем на основі кубічних, гексагональних чи Лайб-решіток показують, що у наближенні сильного зв'язку найближчих і наступних сусідів при певних співвідношеннях між інтегралами перекриття низько збуджені енергетичні стани описуються гамільтоніаном Дірака, який відповідає без масовим частинкам, які рухаються у двовимірному конфігураційному просторі. Власні значення такого оператора Дірака у випадку ідеальної кристалічної структури формують три енергетичні зони, дві з яких в околі особливих, так званих конічних, точок зони Бріллюєна з координатами, що визначаються симетрією, лінійно залежать від хвильового вектора і стикаються вершинами, і бездисперсійної плоскої зони, яка проходить через вершини конічних енергетичних поверхонь двох вище згаданих зон. В досліджуваній тут моделі хаотичний потенціал збурення у першому наближенні викликає переходи лише між дисперсійними зонами. У відповідності з цими зауваженнями оператор Гамільтона має такий вигляд:

$$\hat{H} = -i \frac{v_F \hbar}{\sqrt{2}} (0 \hat{k}_- w^*; \hat{k}_+ 0 \hat{k}_-; w \hat{k}_+ 0) = \hat{H}_0 + \hat{W}(\vec{r}). \quad (1)$$

де використано позначення $\hat{k}_{\pm} = \partial_x \pm i \partial_y$ для компонент квазіімпульсу, а матричні елементи записані у вигляді рядків. Щодо v_F , то це фермієвська швидкість електронів або фазова швидкість тих хвиль, які описуються в термінах псевдоспін-1 системи.

Стосовно хаотичного потенціалу, який вибрано у вигляді $w(\vec{r}) = u(\vec{r}) + i v(\vec{r})$, тут прийняті наступні припущення:

1. Статистика потенціалу така, що для розщеплення кореляційних функцій можна застосувати теорему Віка. Це означає, що середні корелятори непарних порядків дорівнюють нулю.

2. Дійсна і уявна частина випадкового поля є статистично незалежними. В поєднанні з попереднім припущенням звідси випливає, що $\langle u(\vec{r}) v(\vec{r}') \rangle = \langle v(\vec{r}) u(\vec{r}') \rangle = 0$.

3. Дійсна і уявна частини розподілені за одним і тим самим законом зрівнями нулю математичними сподіваннями і рівними дисперсіями. У відповідності з цим має місце співвідношення між бінарними середніми $\langle u(\vec{r}) u(\vec{r}') \rangle = \langle v(\vec{r}) v(\vec{r}') \rangle \equiv S(\vec{r} - \vec{r}')/2$.

4. Усереднення по реалізаціях випадкового поля відновлює трансляційну симетрію в силу чого власна енергетична частина у координатному представленні залежить від різниці координат. Слід зауважити, що тут розглядається ізотропна система, а тому парний корелятор залежить лише від модуля $|\vec{r} - \vec{r}'|$.

2. Функція Гріна ідеальної псевдоспін-1 системи

В подальших викладках застосовується метод резольвентної функції Гріна, яка за визначенням має такий вигляд:

$$\hat{G} = (E \hat{I} - \hat{H}_0 - \hat{W})^{-1}. \quad (2)$$

У відповідності з формулою (2) функція Гріна ідеальної системи записується так:

$$\hat{G} = (E \hat{I} - \hat{H}_0)^{-1}. \quad (3)$$

В силу трансляційної симетрії має зміст перейти до представлення плоских хвиль з базисною функцією довгохвильового наближення

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} e^{i \vec{k} \vec{r}}. \quad (4)$$

що для Гамільтоніану $\hat{H}_0$ дає

$$\hat{H}_0(\vec{k}) = \frac{v_F \hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & k_- & 0 \\ k_+ & 0 & k_- \\ 0 & k_+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

де $k_{\pm} = k_x \pm k_y$. Розв'язавши рівняння на власні значення оператора $\hat{H}_0(\vec{k})$ яке має такий вигляд:

$$\hat{H}_0(\vec{k})\vec{e} = E\vec{e}. \quad (6)$$

можна знайти власні значення

$$E_1(\vec{k}) = v_F \hbar \sqrt{k_x^2 + k_y^2} = v_F \hbar k \equiv \varepsilon(\vec{k}); E_2 = 0; E_3(\vec{k}) = -\varepsilon(\vec{k}). \quad (7)$$

і відповідні їм ортонормовані власні вектори

$$\vec{e}_{1,3}^T(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{-\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})}, 1, \frac{\mp \varepsilon^+(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \right); \vec{e}_2^T(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{-\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon^+(\vec{k})}, 0, 1 \right); \quad (8)$$

Тут використано позначення: $\varepsilon^{\pm}(\vec{k}) = \frac{\hbar v_F}{\sqrt{2}} (k_x \pm i k_y)$.

Відома система власних векторів дозволяє побудувати матрицю $\hat{U}(\vec{k})$ унітарного перетворення

$$\hat{U}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} & -\frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon^+(\vec{k})} & \frac{\varepsilon^-(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \\ 1 & 0 & 1 \\ -\frac{\varepsilon^+(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} & 1 & \frac{\varepsilon^+(\vec{k})}{\varepsilon(\vec{k})} \end{pmatrix}; \quad (9)$$

застосування якого приводить матрицю $\hat{H}_0(\vec{k})$ до діагональної форми з діагональними елементами, які визначені формулами (7). У відповідності із загальною відомими результатами спектр ідеальної псевдо-спін-1 системи складається із двох дисперсійних зон $E_1(\vec{k})$ і $E_3(\vec{k})$ з лінійною залежністю від хвильового числа і плоскої зони з енергією E_2 . Плоска зона є виродженою з кратністю, яка дорівнює кількості точок у першій зоні Бріллюєна.

Перетворення Фур'є з базисними функціями (4) в комбінації з унітарним перетворенням, яке визначається матрицею (9) приводять матричної форми функції Гріна

трансляційно інваріантної псевдо-спін-1 системи

$$\hat{G}_0(\vec{k}) = \frac{1}{D(E, \vec{k})} \begin{pmatrix} E^2 - \frac{\varepsilon^2(\vec{k})}{2} & -E\varepsilon^-(\vec{k}) & [\varepsilon^-(\vec{k})]^2 \\ -E\varepsilon^+(\vec{k}) & E^2 & -E\varepsilon^-(\vec{k}) \\ [\varepsilon^+(\vec{k})]^2 & -E\varepsilon^+(\vec{k}) & E^2 - \frac{\varepsilon^2(\vec{k})}{2} \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Причому тут

$$D(E, \vec{k}) \equiv \text{Det}[\hat{G}_0(\vec{k})]^{-1} = E[E^2 - \varepsilon^2(\vec{k})]. \quad (11)$$

детермінант оберненої функції Гріна, нулі якого визначають спектр.

3. Наближення Борна для функції Гріна системи з хаотичним між-зонним потенціалом

Розклад функції Гріна (2), яка відповідає певній реалізації хаотичного потенціалу, в ряд по степенях оператора $\hat{W}(\vec{r})$ дає

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \sum_{n=1}^{\infty} (\hat{W} \hat{G}_0 \hat{W} \hat{G}_0 \dots \hat{W})_n \hat{G}_0. \quad (12)$$

де n визначає кількість операторів збурення у кожному із доданків.

Усереднення цього ряду по реалізаціях випадкового потенціалу приводить для усередненої функції Гріна, яку позначено як $\hat{\bar{G}}$, до наступного співвідношення:

$$\hat{\bar{G}} \equiv \langle \hat{G} \rangle = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{W} \hat{G}_0 \hat{W} \hat{G}_0 \dots \hat{W} \rangle_n \hat{G}_0. \quad (13)$$

Тут дужки $\langle \dots \rangle$ вказують на те, що має місце усереднення по реалізаціях випадкового оператора $\hat{W}(\vec{r})$. У відповідності із загально прийнятою методикою зручно ввести вершинний оператор $\hat{\Gamma}$, визначивши його за формулою:

$$\hat{\Gamma} = \sum_{n=1}^{\infty} \langle \hat{W} \hat{G}_0 \hat{W} \hat{G}_0 \dots \hat{W} \rangle_n. \quad (14)$$

Варто зауважити, що у формулі (14) як і в попередніх (12) і (13), у кожному із членів розкладу виконується сумування по матричним індексам і інтегрування по внутрішніх координатах. У відповідності з означенням (14) вершинний оператор $\hat{\Gamma}$ приймає на себе всю відповідальність за статистичні властивості хаотичного поля, а усереднена функція Гріна тепер записується так:

$$\hat{\bar{G}} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{\Gamma} \hat{G}_0. \quad (15)$$

В свою чергу власна енергетична частина $\hat{\Sigma}$ визначена за формулою

$$\hat{\bar{G}}^{-1} = \hat{G}_0^{-1} - \hat{\Sigma}. \quad (16)$$

пов'язана із вершинною частиною співвідношенням

$$\hat{\Sigma} = (\hat{I} + \hat{\Gamma} \hat{G}_0)^{-1} \hat{\Gamma}. \quad (17)$$

яке одержується виключенням функції Гріна із формул (15) і (16).

Обчислення вершинного оператора $\hat{\Gamma}$ можливе лише при специфічній структурі оператора хаотичного поля і його статистичних властивостях. Приймавши до уваги вище описані обмеження щодо цих властивостей

та вважаючи, що флуктуації поля достатньо малі, можна використати наближення Борна, у відповідності з яким

$$\hat{\mathcal{L}} = \langle \hat{\mathcal{W}} \hat{G}_0 \hat{\mathcal{W}} \rangle. \quad (18)$$

що в поєднанні з (16) повністю визначає усереднену функцію Гріна.

4. Власна енергетична частина

Підстановка матриці збурення $\hat{\mathcal{W}}$ в співвідношення (18) дає для власної енергетичної частини наступний результат:

$$\hat{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}') = \begin{pmatrix} \langle w^*(\vec{r}) G_{33}^0(\vec{r} - \vec{r}') w(\vec{r}') \rangle & 0 & \langle w^*(\vec{r}) G_{31}^0(\vec{r} - \vec{r}') w^*(\vec{r}') \rangle \\ 0 & 0 & 0 \\ \langle w(\vec{r}) G_{13}^0(\vec{r} - \vec{r}') w(\vec{r}') \rangle & 0 & \langle w(\vec{r}) G_{11}^0(\vec{r} - \vec{r}') w^*(\vec{r}') \rangle \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Недіагональний матричний елемент власної енергетичної частини, наприклад Σ_{31} , має таку структуру

$$\Sigma_{13} = \langle w(\vec{r}) G_{13}^0 w(\vec{r}') \rangle = \langle [u(\vec{r}) - iv(\vec{r})] G_{13}^0 [u(\vec{r}') - iv(\vec{r}')] \rangle$$

Прийнявши до уваги статистичні властивості хаотичного поля, виражені вище в пунктах 2) і 3), можна отримати результат, за яким $\Sigma_{13} = 0$. Очевидно, що такий же висновок має місце і для матричного елемента Σ_{31} .

Слід зауважити, що «затравочна» функція Гріна $\hat{G}^0(\vec{k})$ подана у предсталенні хвильового вектору формулою (10) містить матричні елементи $G_{13}^0(\vec{k}) \sim [\varepsilon^-(\vec{k})]^2$ і $G_{31}^0(\vec{k}) \sim [\varepsilon^+(\vec{k})]^2$, наявність яких приводить до появи у секулярному рівнянні множників $k_x^2 - k_y^2$ і $k_x k_y$. Ці множники свідчать, що при більш загальних статистичних властивостях хаотичного поля система стає анізотропною. Проте, в межах прийнятої тут моделі хаотичного поля відповідні множники випадають із секулярного рівняння чим відновлюється ізотропність системи. Отже, необхідність прийняття пункту 4) раніше описаних припущень стосовно випадкового поля по суті диктується вимогою ізотропності системи.

Таким чином матриця власної енергії в решті решт набуває діагональної форми, а саме:

$$\hat{\Sigma}(\vec{r} - \vec{r}') = \text{Diag}[G_{33}^0(\vec{r} - \vec{r}') S(\vec{r} - \vec{r}'), 0, G_{11}^0(\vec{r} - \vec{r}') S(\vec{r} - \vec{r}')]. \quad (20)$$

Після Фур'є перетворення матриці (20) з врахування явного вираження матричних елементів $G_{11}^0(\vec{q}) = G_{33}^0(\vec{q})$ затравочної функції Гріна (10) нетривіальний вклад до власної енергії можна привести до такого вигляду:

$$\Sigma_{11}(\vec{q}) = \Sigma_{33}(\vec{q}) \equiv \Sigma(\vec{q}) = (2\pi)^2 \int \frac{[E^2 - \varepsilon^2(Q)/2] J_0(QR) J_0(qR)}{E[E^2 - \varepsilon^2(Q)]} S(R) Q dQ R dR. \quad (21)$$

де $J_0(x)$ – функція Бесселя [15], причому при одержанні формули (21) виконано інтегрування по кутових змінних і враховано ізотропність парної кореляційної функції $S(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ позначеної тут як $S(R)$.

Розкладом підінтегральної функції у формулі (21) на прості дробі можна переконатися, що як наслідок існування у спектрі бездисперсійної зони, власна енергія має сингулярність типу $1/E$. Як можливий спосіб усунути вказану сингулярність є перенормування затравочної функції Гріна. Виділення найбільш сингулярного вкладу до цієї функції дає для нього співвідношення

$$G_s^0 = \frac{1}{2E} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2[\varepsilon^-(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q})]^2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2[\varepsilon^+(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q})]^2 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Підстановкою (22) у Фур'є перетворення рівняння (14) дозволяє виконати часткове підсумовування ряду і в довгохвильовому наближенні, тобто при $q \rightarrow 0$, одержати для сингулярного вкладу до вершинної частини такий результат

$$\hat{\mathcal{L}}_s = \text{Diag}[\frac{\Delta^2}{2E}, 0, \frac{\Delta^2}{2E}]. \quad (23)$$

в якому введено позначення:

$$\Delta^2 = 2\pi^2 S(0). \quad (24)$$

Поєднання (23) і (17) дає для перенормованої власної енергії таке остаточне співвідношення:

$$\hat{\Sigma}_s = \text{Diag}[\frac{2E\Delta^2}{E^2 + \Delta^2}, 0, \frac{2E\Delta^2}{E^2 + \Delta^2}]. \quad (25)$$

з якого випливає, що регуляризація за запропонованою схемою дійсно усуває зауважену вище сингулярність.

5. Функція Гріна першого наближення. Енергетичний спектр системи

Підстановка власної частини (25) у співвідношення (16) приводить до першого наближення перенормованої оберненої матриці Гріна, яке має такий вигляд:

$$\Xi_r^{-1} = \begin{pmatrix} \Omega & \varepsilon^-(\vec{q}) & 0 \\ \varepsilon^+(\vec{q}) & E & \varepsilon^-(\vec{q}) \\ 0 & \varepsilon^+(\vec{q}) & \Omega \end{pmatrix}. \quad (26)$$

де Ω визначається формулою

$$\Omega = \frac{(E^3 - E\Delta^2)}{(E^2 + \Delta^2)}. \quad (27)$$

Порівнявши (26) і (6), можна встановити у явній формі оператор Гамільтона пернормований за рахунок флуктацій випадкового поля. Рівняння на власні значення для матриці (26) має очевидну форму, а саме:

$$\mathcal{E}_r^{-1}\vec{u} = \lambda\vec{u}, \quad (28)$$

а його власні значення виражаються формулами:

$$\lambda_1 = \frac{\Omega+E}{2} + \sqrt{\left(\frac{\Omega-E}{2}\right)^2 + \varepsilon^2(\vec{q})}; \lambda_2 = \Omega; \lambda_3 = \frac{\Omega+E}{2} - \sqrt{\left(\frac{\Omega-E}{2}\right)^2 + \varepsilon^2(\vec{q})}. \quad (29)$$

Відповідні ортонормовані власні вектори мають такий вигляд:

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{D_1} \begin{pmatrix} \varepsilon^-(\vec{q}) \\ \lambda_1 - \Omega \\ \varepsilon^+(\vec{q}) \end{pmatrix}, \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\varepsilon^-(\vec{q}) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{u}_3 = \frac{1}{D_3} \begin{pmatrix} \varepsilon^-(\vec{q}) \\ \lambda_3 - \Omega \\ \varepsilon^+(\vec{q}) \end{pmatrix}, \quad (30)$$

Причому тут

$$D_{1,3} = \sqrt{(\lambda_{1,3} - \Omega)^2 + \varepsilon^2(\vec{q})}$$

Відомі значення власних векторів дозволяють побудувати унітарну матрицю

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon^-(\vec{q})}{D_1} & \frac{\lambda_1 - \Omega}{D_1} & \frac{\varepsilon^+(\vec{q})}{D_1} \\ -\frac{\varepsilon^-(\vec{q})}{\varepsilon^+(\vec{q})\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\varepsilon^-(\vec{q})}{D_3} & \frac{\lambda_3 - \Omega}{D_3} & \frac{\varepsilon^+(\vec{q})}{D_3} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

яка діагоналізує матрицю $\mathcal{E}_r^{-1}$, а з нею і $\mathcal{E}_r$. Після застосування унітарного перетворення функція Гріна першого наближення записується так:

$$\hat{U}\hat{\mathcal{E}}_r\hat{U}^{-1} = \hat{A} = \text{Diag}\{1/\lambda_1, 1/\lambda_2, 1/\lambda_3\}. \quad (32)$$

У відсутності хаотичного потенціалу, тобто, коли $\vec{W} = 0$, а разом з цим оператором дорівнює нулю також бінарний корелятор $S(\vec{r} - \vec{r}')$, одержані вище власні значення, власні вектори і матриця унітарного перетворення зводяться до наступних виразів

$$\lambda_1 = E + \varepsilon(\vec{q}), \lambda_2 = E, \lambda_3 = E - \varepsilon(\vec{q})$$

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \varepsilon^-(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q}) \\ 1 \\ \varepsilon^+(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q}) \end{pmatrix}; \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\varepsilon^-(\vec{q})/\varepsilon^+(\vec{q}) \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \vec{u}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\varepsilon^-(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q}) \\ 1 \\ -\varepsilon^+(\vec{q})/\varepsilon(\vec{q}) \end{pmatrix}, \quad (33)$$

які повністю узгоджуються з результатами (6) і (7), встановленими для ідеальної псевдоспін-1 системи.

Загально відомо, що енергетичний спектр визначається полюсами функції Гріна. Приймавши до уваги діагональну форму (32) і співвідношення (29) для власних значень можна записати рівняння:

$$\frac{\Omega+E}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Omega-E}{2}\right)^2 + \varepsilon^2(\vec{q})} = 0; \Omega = 0; \quad (34)$$

розв'язками яких є

$$E_{1,3} = \pm \left\{ \frac{\varepsilon^2(\vec{q}) + \Delta^2}{2} + \sqrt{\left[\frac{\varepsilon^2(\vec{q}) + \Delta^2}{2} \right]^2 + \Delta^2 \varepsilon^2(\vec{q})} \right\}^{1/2} \quad (35); E_2 = 0; E_2^{1,2} = \pm \Delta. \quad (36)$$

Одержані результати показують, що стосовно енергетичного спектру основна його перебудова випадковим полем полягає у появі енергетичної флуктуаційної щільності $E_g = 2\Delta$. Окрім цього в околі особливих точок спектр із лінійного властивого безмасовим частинкам набуває вигляду, який характерний для масивних релятивістських частинок з енергією спокою, що дорівнює півширині Енергетичної щільності. В прийнятих тут наближеннях зберігається наявність плоскої бездисперсійної зони з енергією $E_2 = 0$. Щодо $E_2^1 = \Delta, E_2^2 = -\Delta$, то ці значення можна тлумачити як рівні відщеплені від енергетичних зон $E_{1,3}(\vec{q})$ і визначають екстремуми дисперсійних зон.

6. Ренормована власна енергетична частина, функція Гріна і енергетичний спектр удругому наближенні

Ренормовану власну енергетичну частину можна одержати підстановкою відповідних матричних елементів функції Гріна першого наближення $\hat{\mathcal{E}}_r$ в співвідношення (20) з попереднім перетворенням Фур'є одержаного результату. Оскільки сингулярна частина власної енергії вже врахована у функції Гріна $\hat{\mathcal{E}}_r$, то тут мова іде про регулярну власну енергетичну частину, при одержанні якої слід врахувати, що матричні елементи $\mathcal{E}_{r,11}$ і $\mathcal{E}_{r,33}$ рівні між собою, а різниця сингулярних вкладів $1/2\Omega$ і $\hat{G}_s^0$ має вищий порядок малості, а саме $\sim \Delta^4$, по флуктуаціях випадкового поля, а тому з точністю до Δ^4 може бути знехтуваною. Після виділення і врахування сингулярного вкладу та інтегрування по кутових змінних, що можливе у силу ізотропності системи, для власної енергетичної частини одержується співвідношення:

$$\tilde{\mathcal{E}}(\vec{q}) = \frac{2\pi^2 E}{(v_F \hbar)^2} \int \frac{S(R) J_0(qR) J_0(QR)}{(v_F \hbar)^2 - Q^2} Q dQ R dR. \quad (37)$$

яке є аналогом формули (21).

Що ж до інтегрування по хвильовому числу Q , то результат залежить від знаку $E\Omega$. Якщо $E\Omega/(\hbar v_F)^2 = -\kappa^2 < 0$, що відповідає значенням енергії, які належать флуктуаційній щілині, то інтегрування дає:

$$\tilde{\Sigma}(\vec{q}) = -\frac{2\pi^2 E}{(v_F \hbar)^2} \int_0^\infty K_0(\kappa R) J_0(qR) S(R) R dR. \quad (38)$$

де $K_0(x)$ – функція Макдональда [15].

В іншому випадку, а саме, коли $E\Omega/(\hbar v_F)^2 = k^2 > 0$, що має місце для значень енергії, які належать дисперсійним зонам, співвідношення (37) набуває такої форми:

$$\tilde{\Sigma}(\vec{q}) = \frac{\pi^3 E}{(v_F \hbar)^2} \int_0^\infty [N_0(kR) + i \text{Sign} E J_0(kR)] J_0(qR) S(R) R dR. \quad (39)$$

в якій $N_0(x)$ – функція Неймана [15].

Одержана поправка до власної енергетичної частини адитивно входить до складу відповідних діагональних елементів матриці оберненої функції Гріна $\hat{\Sigma}^{-1}$, тобто:

$$\hat{\Sigma}^{-1} = \hat{\Sigma}_r^{-1} - \text{Diag}(\tilde{\Sigma}(\vec{q}), 0, \tilde{\Sigma}(\vec{q})). \quad (40)$$

Структура цієї матриці показує, що всі попередні результати виражені формулами (28)-(31) залишаються в силі після заміни $\Omega \rightarrow \Omega - \tilde{\Sigma}(\vec{q})$. Це стосується функції Гріна, її власних значень і відповідних власних векторів, а також унітарного перетворення (31), яке приводить матрицю Гріна до діагональної форми.

Застосування згаданого перетворення дає для функції Гріна другого наближення $\hat{\Sigma}_f \equiv \hat{U} \hat{\Sigma} \hat{U}^{-1}$ в представленні власних векторів, виражених формулами (30), наступний результат:

$$\hat{\Sigma}_f = \text{Diag}\{1/\tilde{\lambda}_1, 1/\tilde{\lambda}_2, 1/\tilde{\lambda}_3\}. \quad (41)$$

Тут кожен із знаменників $\tilde{\lambda}_i$ одержується із формул (29) заміною Ω на $\Omega - \tilde{\Sigma}(\vec{q})$, в силу чого дисперсійні рівняння (34) набувають такого вигляду:

$$\frac{\Omega - \tilde{\Sigma}(q) + E}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\Omega - \tilde{\Sigma}(q) - E}{2}\right)^2 + \varepsilon^2(\vec{q})} = 0; \quad \Omega - \tilde{\Sigma}(q) = 0. \quad (42)$$

При підстановці (27) в кожне із рівнянь (42) із заміною власної енергії на її значення при енергії, що виражається формулами (35). (36) енергії отримуються рівняння четвертого степеню або кубічне рівняння, розв'язки яких у основних порядках по $\tilde{\Sigma}(q)$ записуються так:

$$\begin{aligned} \tilde{E}_{1,3} &= \pm \left\{ \frac{\varepsilon^2(\vec{q}) + \Delta^2}{2} + \sqrt{\left[\frac{\varepsilon^2(\vec{q}) + \Delta^2}{2} \right]^2 + \Delta^2 \varepsilon^2(\vec{q})} + \frac{\tilde{\Sigma}(q)}{4} \right\}^{1/2}; \\ \tilde{E}_2 &= 0, \quad \tilde{E}_2^{1,2} = \pm \Delta + \frac{\tilde{\Sigma}(q)}{2}. \end{aligned} \quad (43)$$

Висновки

В загальному вигляді встановлена функція Гріна псевдоспін-1 системи з врахуванням недиагонального хаотичного потенціалу, який в операторі Гамільтона є відповідальним за переходи між дисперсійними зонами. Власна енергетична частина в наближенні Борна відзначається сингулярністю, пов'язаною з плоскою бездисперсійною зоною. Функція Гріна першого наближення обчислена після перенормування власної енергії, яка усуває згадану сингулярність. Використання функції Гріна першого наближення дозволяє знайти власну енергетичну частину, що, в свою чергу приводить до можливості обчислити перенормовану функцію Гріна у вищому, ніж перше наближенні.

Власна енергетична частина виражається в термінах парного корелятора хаотичного поля і може бути конкретизована шляхом уточнення парної кореляційної функції випадкового потенціалу.

Енергетичний спектр встановлений як полюси функції Гріна на відміну від безщілинного затравочного закону дисперсії змінюється так, що в околі рівня Фермі виникає флуктуаційна щілина пропорційна середній квадратичній дисперсії потенціалу.

За рахунок того, що власна енергія набуває уявну частину, розсіяння на флуктуаціях випадкового поля приводить до появи згасання енергетичних станів неперервного спектру. Відповідний декремент згасання залежить від явного вигляду парної кореляційної функції хаотичного поля.

В спектрі також зберігається плоска бездисперсійна зона, проте з'являються ще дві зони, які мають суто флуктуаційне походження.

Література

1. Novoselov, K. S., Geim, A. K., & Firsov, A. A. (2005). Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene. *Nature*, 438, 197–200. <https://doi.org/10.1038/nature04233>
2. Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., & Geim, A. K. (2008, February 29). *The electronic properties of graphene* (arXiv:0709.1163v2 [cond-mat.other]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/0709.1163>
3. Wehling, T. O., Black-Schaffer, A. M., & Balatsky, A. V. (2014). Dirac materials. *Advances in Physics*, 63(1), 1–77. <https://doi.org/10.1080/00018732.2014.927109>
4. Dóra, B., Kailasvuori, J., & Moessner, R. (2011, October 18). *Lattice generalization of the Dirac equation to general spin and the role of the flat band* (arXiv:1104.0416v3 [cond-mat.quant-gas]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/1104.0416>

5. Fang, A., Zhang, Z. O., Louie, S. G., & Chan, C. T. (2019). Pseudospin-1 physics of photonic crystals. *AAAS Research*, 2019, Article ID 3054062. <https://doi.org/10.34133/2019/3054062>
6. Fang, A., Zhang, Z. O., Louie, S. G., & Chan, C. T. (2016). Klein tunneling and supercollimation of pseudospin-1 electromagnetic waves. *Physical Review B*, 93(3), 035422. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.035422>
7. Diebel, F., Leykam, D., Kroesen, S., Denz, C., & Desyatnikov, A. S. (2016). Conical diffraction and composite Lieb bosons in photonic lattices. *Physical Review Letters*, 116(18), 183902. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.183902>
8. Drost, R., Ojanen, T., Harju, A., & Liljeroth, P. (2017). Topological states in engineered atomic lattices. *Nature Physics*, 13(7), 668–671. <https://doi.org/10.1038/nphys4080>
9. Slot, M. R., Gardenier, T. S., Jacobse, P. N., et al. (2017). Experimental realization and characterization of an electronic Lieb lattice. *Nature Physics*, 13(7), 672–676. <https://doi.org/10.1038/nphys4105>
10. Niță, M., Ostahie, B., & Aldea, A. (2013, January 9). *Spectral and transport properties of the two-dimensional Lieb lattice* (arXiv:1301.1807v1 [cond-mat.mes-hall]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/1301.1807>
11. Urban, D. F., Bercioux, D., Wimmer, M., & Häusler, W. (2019, July 16). *Barrier transmission of Dirac-like pseudospin-one particles* (arXiv:1907.6983v1 [cond-mat.dis-nn]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/1907.06983>
12. Fang, A., Zhang, Z. O., Louie, S. G., & Chan, C. T. (2017). Anomalous Anderson localization behaviors in disordered pseudospin systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 114(16), 4087–4092. <https://doi.org/10.1073/pnas.1621054114>
13. Kim, S., & Kim, K. (2019, July 16). *Effect of disorder correlation on Anderson localization of two-dimensional massless pseudospin-1 Dirac particles in a random one-dimensional scalar potential* (arXiv:1907.06982v1 [cond-mat.dis-nn]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/1907.06982>
14. Taie, S., Ozawa, H., Nishio, T., Nakajima, S., & Takahashi, Y. (2015, June 1). *Matter-wave localization and delocalization of ultracold bosons in an optical Lieb lattice* (arXiv:1506.00587v1 [cond-mat.quant-gas]). arXiv. <https://arxiv.org/abs/1506.00587>
15. Abramowitz, M., & Stegun, I. A. (1964). *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. National Bureau of Standards.