

Динамика электронных уровней в присутствии примеси и модель Руйзенарса–Шнайдера

В. Г. Марихин¹⁾

Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 117940 Москва, Россия

Поступила в редакцию 12 ноября 2002 г.

После переработки 3 декабря 2002 г.

Показано, что уравнения динамики уровней энергии конечной системы при добавлении примесей эквивалентны рациональной системе Руйзенарса–Шнайдера. Вычислено действие, которое одновременно является производящей функцией канонического преобразования Бэклунда для этой системы. Обсуждаются различные варианты статистического усреднения распределения уровней энергии.

PACS: 71.55.Ak, 45.20.Jj, 02.30.Pk

Задаче о динамике уровней электронной системы под воздействием дополнительного возмущения посвящен целый ряд работ (см., например, [1, 2]). Роль времени в такой динамике играет амплитуда возмущения. В этих работах в основном изучаются статистические свойства спектров, то есть при вычислении отклика системы на дополнительное возмущение производится усреднение, например, по ансамблю случайных матриц. Интересна и другая постановка задачи: вывести уравнения динамики уровней энергии системы при произвольном начальном спектре, а затем произвести усреднение, причем в этом случае процедура усреднения может отличаться, например, от используемой в теории случайных матриц. Задача о динамике спектра системы при произвольном виде возмущения была решена в работе [3]. Полученная в этой работе система содержит в качестве неизвестных функций как собственные значения, так и матричные элементы возмущения, поэтому она сложна для анализа. С физической точки зрения можно рассматривать в качестве возмущения примесный потенциал, что сильно упрощает задачу, более того, многопримесная задача может быть сведена к задаче с одной примесью (см. ниже).

Рассмотрим конечную квантовую систему с N собственными состояниями и гамильтонианом \hat{H}_0 (матрица $N \times N$). При добавлении примеси в систему уровни энергии будут сдвигаться (в таком виде задача рассматривалась, например, в [4] и [5]); проблема состоит в том, чтобы найти уравнения динамики уровней энергии, причем роль времени играет величина потенциала примеси.

Гамильтониан системы с примесью имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + t|0\rangle\langle 0|, \quad (1)$$

где $|0\rangle$ – квантовое состояние, локализованное на примеси.

Для простоты будем обозначать x и y собственные значения, а $|x\rangle$ и $|y\rangle$ – собственные функции невозмущенной и возмущенной систем, соответственно, то есть

$$\hat{H}_0|x\rangle = x|x\rangle, \quad \hat{H}|y\rangle = y|y\rangle; \quad (2)$$

тогда, вычисляя матричный элемент $\langle x|\hat{H}|y\rangle = \langle x|\hat{H}_0 + \hat{V}|y\rangle$, получаем условие

$$y\langle x|y\rangle = x\langle x|y\rangle + t\langle x|0\rangle\langle 0|y\rangle,$$

из которого следует уравнение на собственные значения возмущенной системы

$$t \sum_x \frac{|\langle x|0\rangle|^2}{y-x} = 1,$$

или в явном виде:

$$t \sum_j^N \frac{|\langle x_j|0\rangle|^2}{y_i - x_j} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (3)$$

Обозначив $y_i = x_i(t)$, $x_i = x_i(0)$, можно переписать уравнение (3) в полиномиальном виде

$$P(x_j(t), t) = 0, \\ P(\xi, t) = \prod_j (\xi - x_j(t)) = P(\xi) - tQ(\xi), \quad (4)$$

где

$$P(\xi) = P(\xi, 0) = \prod_i (\xi - x_i(0)), \\ Q(\xi) = P(\xi) \sum_i \frac{\dot{x}_i(0)}{\xi - x_i(0)}, \quad (5)$$

причем $\dot{x}_i(0) = |\langle x|0\rangle|^2$.

¹⁾e-mail: mvg@itp.ac.ru

Отметим, что случай $Q(\xi) = (1/N)P'(\xi) \iff \iff \dot{x}_i(0) = 1/N$ соответствует невозмущенному гамильтониану \hat{H}_0 (2), собственные функции которого являются плоскими волнами с равными по модулю матричными элементами, при этом $\sum_x |\langle x|0\rangle|^2 = 1$.

Из условия (4) следует, что $(\partial^2/\partial t^2)P(\xi, t) = 0$. Подставляя выражение для $P(\xi, t)$, получаем искомое уравнение, описывающее динамику уровней:

$$\ddot{x}_i = 2\dot{x}_i \sum_{j \neq i} \frac{\dot{x}_j}{x_i - x_j}. \quad (6)$$

Это уравнение, описывающее динамику многочастичной системы, является известной рациональной системой Руйзенарса–Шнайдера (РШ) [6, 7].

Нетрудно заметить, что формулы (4) и (5) определяют точное решение задачи Коши для системы РШ (6) – действительно, вычисляя полиномы $P(\xi)$ и $Q(\xi)$ по формулам (5), можно найти полином $P(\xi, t)$ (4), корни которого являются положениями частиц $x_i(t)$. В задаче о примеси (3) все скорости \dot{x}_i положительны.

Тот факт, что рациональная система РШ описывает динамику уровней конечной системы при добавлении примеси, является, по-видимому, новым. В работе [3] было выведено уравнение динамики электронных уровней для произвольного возмущения V , а уравнение (6) не было получено.

Отметим, что в случае конечной системы любой примесный потенциал имеет вид

$$V = \sum_j^N t_j |j\rangle \langle j|,$$

где $|j\rangle$ – состояние, локализованное в координатном пространстве на узле с номером j . Уравнение на собственные значения возмущенной системы в этом случае имеет вид (сравни с (3))

$$\det(\delta_{ij} - G_{ij}t_j) = 0, \quad G_{ij} = \sum_x \frac{\langle i|x\rangle \langle x|j\rangle}{y - x}. \quad (7)$$

Полином $P(\xi, t_1, t_2, \dots, t_N) = \prod_j (\xi - x_j(t_1, t_2, \dots, t_N))$ в случае нескольких примесей является линейной функцией по величине потенциала t_j каждой примеси, поэтому для любого j выполняется условие $(\partial^2/\partial t_j^2)P(\xi, t_1, t_2, \dots, t_N) = 0$, а значит, динамика по каждому “времени” t_j описывается уравнением (6). Действительно, рассмотрим последовательность

$$H_0 \rightarrow H_1 \rightarrow \dots \rightarrow H_{j-1} \rightarrow H_j \rightarrow \dots \rightarrow H_N, \\ H_j = H_{j-1} + t_j |j\rangle \langle j|,$$

причем набор собственных значений гамильтониана H_j определяется по формуле (3), где x – собственные

значения H_{j-1} , y – собственные значения H_j , а $\langle x|0\rangle$ надо заменить на $\langle x|j\rangle$.

Пусть $\langle x_k^j|$ – собственные функции гамильтониана H_j . Определим моменты времени $T_0 = 0$, $T_j = T_{j-1} + t_j$, $j = 1, 2, \dots, N$. Тогда эволюция уровней энергии в случае нескольких примесей может быть описана уравнением РШ (6) с одним временем t на интервалах $t \in (T_0, T_1) \cup (T_1, T_2) \cup (T_2, T_3) \dots$, причем скорости \dot{x} меняются скачком в моменты времени $T_1, T_2, T_3 \dots$:

$$\dot{x}_k \Big|_{t=T_j-0} = |\langle x_k^j|j-1\rangle|^2, \quad \dot{x}_k \Big|_{t=T_j+0} = |\langle x_k^j|j\rangle|^2, \quad (8)$$

Как известно (см., например, [8]), система РШ (6) является лагранжевой, а лагранжиан (6) имеет вид

$$L = \sum_i \dot{x}_i \log \left[\dot{x}_i \prod_{j \neq i} (x_i - x_j) \right]. \quad (9)$$

Интересно, что для системы (6) может быть получено точное выражения для действия на классической траектории: предположим, что в момент времени $t = 0$ координаты частиц $x_i(0) = x_i$, а в момент времени $t = T$ координаты частиц $x_i(T) = y_i$. Тогда из (4) следует, что полином $Q(\xi)$ имеет вид

$$Q(\xi) = \frac{1}{T} \left(\prod_i (\xi - x_i) - \prod_i (\xi - y_i) \right). \quad (10)$$

В то же время, дифференцируя $P(\xi, t)$ по t и подставляя $\xi = x_i(t)$, получаем

$$Q(x_i(t)) = \dot{x}_i(t) \prod_{j \neq i} (x_i(t) - x_j(t)). \quad (11)$$

Подставляя (10) и (11) в выражение для лагранжиана (9), вычислим действие

$$S = \int L dt = \sum_i \int dt \dot{x}_i(t) \log Q(x_i(t)) = \\ = \sum_i \int_{x_i}^{y_i} dx \log \frac{1}{T} \left[\prod_j (x - x_j) - \prod_j (x - y_j) \right], \quad (12)$$

или

$$S = \Delta \log \frac{\Delta}{T} + \sum_{i,\alpha} [g(y_i - z_\alpha) - g(x_i - z_\alpha)], \\ g(x) = x \log \frac{x}{e}, \quad \Delta = \sum_i (y_i - x_i), \quad (13)$$

где z_α – корни полинома $Q(x)$:

$$z_\alpha : \prod_j (z_\alpha - x_j) = \prod_j (z_\alpha - y_j), \quad \alpha = 1, 2, \dots, N-1. \quad (14)$$

Необходимо отметить, что вычисленное действие S является одновременно производящей функцией канонического преобразования Бэклунда, то есть

отображения пары импульс–координата в момент времени $t = 0$ в пару импульс–координата при $t = T$: $(\{p_i\}, \{x_i\}) \rightarrow (\{\hat{p}_i\}, \{y_i\})$ для системы (6),

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial x_i}, \quad \hat{p}_i = -\frac{\partial S}{\partial y_i}, \quad (15)$$

причем канонически сопряженные переменные для системы (6) определяются обычным способом:

$$p_i = \frac{\delta L}{\delta \dot{x}_i} = \log(\dot{x}_i) + 1 + \sum_{j \neq i} \log(x_i - x_j), \quad (16)$$

$$H = \sum_i p_i \dot{x}_i - L = \sum_i \dot{x}_i,$$

а скобки Пуассона являются каноническими:

$$\{p_i, x_j\} = \delta_{ij}, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{x_i, x_j\} = 0.$$

Вычислим элемент объема фазового пространства в переменных $\{x_i\}, \{y_i\}$:

$$\prod_i dx_i dp_i = \prod_i dx_i dy_i J(\{x_i\}, \{y_i\}), \quad (17)$$

а якобиан преобразования определяется формулой

$$J(\{x_i\}, \{y_i\}) = \left| \det \left(\frac{\partial p_i}{\partial y_j} \right) \right| = \frac{\prod_{i>j} |x_i - x_j| \prod_{i>j} |y_i - y_j|}{\prod_{i,j} |x_i - y_j|}, \quad (18)$$

поскольку из (16) следует, что $\partial p_i / \partial y_j = \partial \log \dot{x}_i / \partial y_j$, а из (10) и (11) можно найти скорости \dot{x}_i :

$$\dot{x}_i(0) = -\frac{1}{t} \frac{\prod_{i,j} (x_i - y_j)}{\prod_{j \neq i} (x_i - x_j)}.$$

Можно рассматривать полученный якобиан $J(\{x_i\}, \{y_i\})$ как плотность вероятности совместного распределения уровней энергии $\{x_i\}$ невозмущенной и $\{y_i\}$ возмущенной систем, при этом предполагается, что начальное распределение частиц по фазовому объему равномерно, что вполне естественно при рассмотрении динамики гамильтоновских частиц. На самом деле можно зафиксировать начальное положение частиц, тогда статистика определяется распределением импульсов. Таким образом, сделано предположение о равномерном распределении по импульсам частиц в начальном состоянии.

Конечно, функция распределения по импульсам зависит от конкретной реализации системы (1). Например, в работе [4] рассмотрен случай, когда га-

мильтониан H_0 является случайной матрицей из классического гауссовского ансамбля (ортогонального ($\beta = 1$), унитарного ($\beta = 2$) или симплектического ($\beta = 4$)). Отметим, что функция распределения (18) соответствует формальному пределу $\beta \rightarrow 0$ в формуле (5) из работы [4] для функции распределения в случае классических ансамблей.

В заключение отметим, что показано, что динамика уровней энергии конечной квантовомеханической системы при добавлении примеси описывается уравнением РШ. Задача о многих примесях сводится к однопримесной, то есть также описывается уравнением РШ, причем скорости испытывают скачки в процессе эволюции.

Было бы интересно явно описать переход от уравнений динамики уровней (уравнение РШ) к уравнениям динамики функции распределения уровней: в работе [2] показано, что эволюция функции распределения описывается уравнением Фоккера–Планка, которое в этом случае сводится к квантовой системе Калоджеро–Мозера. В то же время, известно (см., например, [8]), что уравнение Калоджеро–Мозера является нерелятивистским пределом уравнения РШ. В этой связи возникает вопрос о связи квантовой модели РШ [7] со статистическими свойствами электронных спектров.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований # 01-01-00874-а и # 00-15-96747-л.

Автор благодарен А. С. Иоселевичу и И. В. Полюбину за полезные замечания, которые помогли улучшить текст статьи.

1. B. D. Simons and B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **70**, 4122 (1993).
2. O. Narayan and B. S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **71**, 2106 (1993).
3. P. Pechukas, Phys. Rev. Lett. **51**, 943 (1983).
4. I. L. Aleiner and K. A. Matveev, Phys. Rev. Lett. **80**, 814 (1998).
5. В. Г. Марихин, Письма в ЖЭТФ **64**, 57 (1996).
6. S. N. M. Ruijsenaars and H. Schneider, Ann. of Phys. **170**, 370 (1986).
7. S. N. M. Ruijsenaars, Commun. Math. Phys. **110**, 191 (1987).
8. H. W. Braden and Ryu Sasaki, Progr. Theor. Phys. **97**, 1003 (1997).