О СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ С ХАОТИЧЕСКИ РАСПОЛОЖЕННЫМИ РАССЕИВАЮЩИМИ ЦЕНТРАМИ

Ю.А.Бычков, А.М.Дыхне

Вопрос о нахождении спектральной плотности энергетических уровней электрона, движущегося в хаотическом поле, рассматривался в ряде работ. Особый интерес представляет исследование окрестности особых точек в спектральной плотности. Этим вопросам посвящен обзор И.М.Лифшица [1].

В настоящем сообщении рассмотрена одномерная модель, в которой может быть получено точное решение. Помимо того, что точное решение служит пробным камнем для различных приближенных подходов, одномерная задача имеет, по-видимому, отношение к органическим молекулам. Мы рассмотрим модель одинаковых (для простоты) произвольно расположенных потенциалов в виде δ-функций и получим для характеристической функции интегральное уравнение, аналогичное уравнению Дайсона [2]. Полученное уравнение позволит исследовать спектральную плотность для широкого класса расположения рассеивающих центров от периодического до полностью хаотического. Точное решение ряда одномерных задач получено также ранее в работах [3-6], в которых, однако, рассматривался только определенный тип распределения рассеивающих центров. Отметим также, что предлагаемый подход связан с функциями Грина и тем самым полностью отличается от общего для работ [3-6] подхода. Это обстоятельство позволяет применить использованный нами метод и для решения других одномерных задач.

Уравнение для определенной обычным способом функции Грина отдельной частицы, описывающей ее движение в поле системы рассеивающих центров в виде δ-функций, может быть формально разрешено. Решение записывается в следующем виде:

$$G(x,x') = G^{(0)}(x,x') - U\sum_{m,n} G^{(0)}(x,x_n)\left(1+U\hat{G}^{(0)}\right)^{-1}_{nm} G^{(0)}(x_m,x'). \qquad (\mathrm{I})$$

Здесь $G^{(0)}(x,x')$ – функция Грина свободной частицы, равная $\frac{im}{k}e^{ik|x-x'|}$ ($k=\sqrt{2mE}$, и положено $\hbar = \mathrm{I}$), потенциал выбран в виде $U\sum_n \delta(x-x_n)$, x_n - положение n-го рассеивающего центра, а $\hat{G}^{(0)}$ - матрица N-го ранга, где N- число центров, с элементами $G^{(0)}_{mn} = G^{(0)}(x_m, x_n)$. Зная функцию Грина, обычным способом [7] находим плотность уровней, для которой получаем выражение

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi k} - \frac{1}{\pi} Im \frac{d}{dE} \ln Det(1 + U\hat{G}^{(0)}). \qquad (2.$$

При выводе соотношения (2) использовались свойства интеграла от произведения двух функций Грина и простые матричные соотношения. Полученное выражение для плотности уровней необходимо усреднить по положениям рассеивающих центров. Для этого заметим, что детерминант, входящий в (2), удовлетворяет рекуррентному соотношению

$$\mathcal{D}_n = \lambda_1(r_n)\mathcal{D}_{n-1} - \lambda_2(r_n)\mathcal{D}_{n-2}, \qquad (3)$$

где $\mathcal{D}_n$ - детерминант, полученный из исходного вычеркиванием первых n строк и столбцов, r_n- расстояние между n-м и n+I- центрами, а

$$\lambda_1(r_n) = 1 + \frac{ik_0}{k} + \left(1 - \frac{ik_0}{k}\right)e^{2ikr_n}, \quad \lambda_2(r_n) = e^{2ikr_n}$$

и

$$k_0 = mU.$$

Существование соотношения (3) вытекает из существенно одномерного вида функции Грина, удовлетворяющей тождеству

$$G^{(0)}(x_n, x_m) = G^{(0)}(x_n, x_{n+1}) \dots G^{(0)}(x_{m-1}, x_m).$$

Для отношения $\frac{\mathcal{D}_n}{\mathcal{D}_{n-1}} = V_n$ из (3) следует

$$V_n = \lambda_1(r_n) - \frac{\lambda_2(r_n)}{V_{n-1}}. \qquad (4)$$

Пусть теперь расстояния между рассеивающими центрами распределены независимо с функцией $f(r_n)$ каждая. Переходя теперь от переменных r_n к переменным V_n, легко получим уравнение для функции распределения $\mathcal{F}(V)$ для величин V_n:

$$\mathcal{F}(V) = \int_0^\infty f(r) \frac{\lambda_2(r)}{[\lambda_1(r) - V]^2} \mathcal{F}\left(\frac{\lambda_2(r)}{\lambda_1(r) - V}\right) dr \qquad (5)$$

(проще всего для вывода (5) усреднить $\delta(V-V_n)$ вначале в переменных V_n, а потом – в переменных r_n). Функция $\mathcal{F}(V)$ зависит от k как от параметра. Очевидно, что

$$\langle \ln \mathcal{D}_0 \rangle = \sum_n \ln V_n = N\int \mathcal{F}(V) \ln V dV. \qquad (6)$$

Подставляя (6) в формулу (2), получаем

$$\rho(E) = \frac{m}{\pi k} - \frac{1}{\pi a} \, Im \frac{d}{dE} \int \mathcal{F}(V) \ln V dV. \qquad (7)$$

Таким образом, задача сводится к отысканию решения интегрального уравнения (5), подробное исследование которого будет выполнено в отдельном сообщении. Здесь же мы остановимся только на одном интересном предельном случае, когда выполняются следующие условия: $k \ll k_0$, $k_0 a \gg 1$ (a – среднее расстояние между центрами), но может быть $ka \sim 1$ и даже $ka \gg 1$. При $k_0 a \gg 1$ для V_n справедливо асимптотическое выражение: $V_n = \frac{ik_0}{k}\left(1-e^{2ikr_n}\right)$. Заметим, что поскольку V_n зависит только от одного расстояния r_n, то в рассматриваемом приближении можно учесть любую корреляцию между различными r_n. Обозначая теперь через $f(r_n)$ проинтегрированную по всем r_m $(m \neq n)$ полную функцию распределения по расстояниям между центрами $f(r_1, \dots, r_N)$, после элементарных математических операций получим окончательно следующую формулу для плотности энергетических уровней

$$\rho(E) = \frac{\pi}{ak^2} \frac{dk}{dE} \sum_{n=0}^{\infty} n f\left(\frac{n\pi}{k}\right). \qquad (8)$$

Это выражение можно просуммировать для частного вида $f(r) = \frac{1}{a} e^{-r/a}$ (распределение Пуассона)

$$\rho(E) = \frac{\pi}{(ak)^2} \frac{dk}{dE} e^{-\pi/ak}\left[1-e^{-\pi/ak}\right]^{-2}. \qquad (9)$$

Выписанная формула соответствует независимому квантованию в потенциальных ямах между центрами с последующим усреднением по расстоянию между центрами. Возможность такого независимого квантования связана с малостью подбарьерного прохождения ($\sim ka/k_0 a$) и, поскольку $k_0 a \gg 1$, справедлива и для больших ka. Отметим следующие особенности формулы (9). Во-первых, при $ka \ll 1$, $\rho \simeq \frac{\pi}{(ak)^2} \times \frac{dk}{dE} e^{-\pi/ak}$, т.е. плотность уровней экспоненциально мала, что связано с экспоненциально малой вероятностью большого $\sim\pi/k$ расстояния между центрами, необходимого для возникновения уровня с малой энергией. Во-вторых, при $ka \gg 1$ плотность уровней $\rho(E)$ переходит в выражение для плотности уровней свободной частицы $\rho_0 = m/\pi k$. В-третьих, плотность уровней при $ka \sim 1$ имеет экстремум, по-видимому, при распределениях, отличных от распределения Пуассона, имеется не один, а несколько экстремумов, причем их число растет с приближением системы к периодической.

Институт теоретической физики
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
17 февраля 1966 г.

Литература

[1] И.М.Лифшиц. УФН, 83, 617, 1964.
[2] F.I.Dyson. Phys. Rev., 92, 1331, 1953.
[3] H.Schmidt. Phys. Rev., 105, 425, 1957.
[4] H.L.Frisch, I.C.Lloyd. Phys. Rev., 120, 1175, 1960.
[5] B.Halperin. Phys. Rev., 139A, 104, 1965.
[6] И.В.Андреев. ЖЭТФ, 48, 1437, 1965.
[7] А.А.Абрикосов, Л.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, стр. 91. Физматгиз, 1962.