

ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РАСТОЯНИЙ МЕЖДУ УРОВНЯМИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНОЙ СЛУЧАЙНОЙ ЦЕПОЧКЕ

В.Л.Покровский

Распределение расстояний между уровнями в системах, в каком-то смысле случайных, в недавнее время вновь вызвало пристальный интерес теоретиков. Физическими примерами таких систем являются атомные ядра в сильно возбужденных состояниях [1,2], малые металлические частицы [3,4].

Описание хаотических систем, принятое в настоящее время, является феноменологическим. Дайсон [2] предполагает, что расстояние между уровнями описывается одним из трех возможных ансамблей (унитарный, симплектический, ортогональный) в зависимости от свойств симметрии системы. Такой же исходной гипотезы придерживаются Горьков и Элиашберг [4]. При этом считается, что эти ансамбли соответствуют максимально хаотизированным системам. Крайне заманчиво попытаться найти аргументы в пользу распределений Дайсона, исходя из общих при-

140

ципов динамики и теории вероятностей хотя бы такого же типа, какие существуют для распределения Гиббса. Кроме того, интересно было бы выяснить, какие ансамбли описывают распределение уровней для полностью хаотических систем.

В настоящей работе исследована простейшая одномерная модель, для которой можно получить явное решение задачи о распределении состояний между уровнями энергии. Полученное распределение не имеет никакого сходства с распределением Дайсона [2]. По-видимому, характер распределения (очень узкие гауссовские пики) в существенных чертах связан с принятыми упрощениями модели (одномерность, отсутствие взаимодействия между "электронами"). Поскольку, однако, это единственный известный пример точно решенной задачи, ее результаты имеют самостоятельный интерес.

Рассмотрим одномерную цепочку потенциальных центров, между которыми движется квантовая частица (электрон). Для упрощения предположим, что радиус действия центра гораздо меньше среднего расстояния между центрами. В нулевом приближении можно считать, что электрон движется в поле с потенциалом:

$$V(x) = a \sum_{n=1}^N \delta(x - x_n). \quad (1)$$

Расстояния между пиками $\ell_n = x_{n+1} - x_n$ считаются случайными величинами, подчиняющимися заданному закону распределения $P(\ell)$. Далее считается, что корреляционные функции $P(\ell_n, \ell_{n'}) - P(\ell_n)P(\ell_{n'})$ достаточно быстро убывает с "расстоянием" $|n - n'|$. Более точно смысл этого условия определится в дальнейшем.

Точная постановка задачи такова. Пусть задана конфигурация Γ - расположение точек $x_1, x_2 \dots x_N$. При заданной конфигурации Γ уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (k^2 - V(x)) \psi = 0 \quad (2)$$

с $V(x)$, заданной формулой (2), и граничными условиями

$$\psi(x_1) = \psi(x_N) = 0 \quad (3)$$

имеет набор дискретных собственных значений k_n . Задача состоит в вычислении средней по всем Γ функции распределения

$Q(k, k')$ расстояний между соседними собственными значениями.

Другими словами, нужно найти вероятность $Q(k, k') dk'$ того, что если k^2 есть уровень энергии, то следующий по номеру уровень лежит между k'^2 и $k'^2 + 2k' dk'$.

До сих пор был рассмотрен вопрос лишь о среднем по всем конфигурациям Γ числе собственных значений в заданном интервале

$$(k, k + dk) \quad [5-11].$$

Ввиду вещественности потенциала $V(x)$ и граничных условий (2) волновая функция ψ также вещественна. В интервале (x_n, x_{n+1}) ее можно записать в виде:

$$\psi = A_n \sin [k(x - x_n) + \varphi_n]. \quad (4)$$

Нетрудно найти связь между φ_n и φ_{n+1} :

$$\operatorname{ctg} \varphi_{n+1} = \operatorname{ctg} (\varphi_n + k l_n) + \varepsilon; \quad \varepsilon = \frac{a}{k}. \quad (5)$$

Полагая $x_1 = 0$, $\varphi_1 = 0$, удовлетворим одно из граничных условий (2). Второе условие выполнится, если положить:

$$\varphi_{N+1} = m\pi, \quad (6)$$

где m — целое. Если условиться, что $\varphi_n + k l_n$ отличается от φ_{n+1} не более, чем на $\pm\pi$, то число m в формуле (6) совпадает с числом нулей волновой функции, т.е. с числом собственных значений, меньше заданного k , или с номером уровня.

Итак, пусть условие (6) выполнено. Поставленная нами задача сводится к следующей: какова вероятность того, что

$$\varphi_{N+1}(k') < (m+1)\pi < \varphi_{N+1}(k' + dk'). \quad (7)$$

Мы использовали легко доказываемую монотонность φ_n как функции k при заданном Γ . Заметим, что φ_{N+1} для произвольного k, Γ можно представить в виде суммы:

$$\varphi_{N+1}(k, \Gamma) = \sum_{n=1}^N \Delta_n(k, \Gamma); \quad \Delta_n(k, \Gamma) = \varphi_{n+1}(k, \Gamma) - \varphi_n(k, \Gamma). \quad (8)$$

Аналогичным образом представим разность:

$$\varphi_{N+1}(k', \Gamma) - \varphi_{N+1}(k, \Gamma) = (k' - k) \sum_{n=1}^N \partial \Delta_n(k, \Gamma) / \partial k. \quad (9)$$

Ограничиться линейными по $(k' - k)$ членами можно лишь в том случае, когда

$$\frac{N \bar{\Delta} (k' - k)^2}{k^2} \ll 1.$$

Но величина $N \bar{\Delta} / k$ по порядку величины совпадает с $\nu(k) = \partial \bar{\pi} / \partial k$, так что наша оценка означает одновременно следующее:

$$\frac{(k' - k)^2}{k} \ll [\nu(k)]^{-2}. \quad (10)$$

Оценка (10) может быть выполнена даже в том случае, если между k и k' укладывается много уровней: $(k' - k) \gg [\nu(k)]^{-2}$.

Условие (6) и (7) можно теперь сформулировать так: какова вероятность того, что

$$\frac{\pi}{k' + dk' - k} < \sum_{n=1}^N \frac{\partial \Delta_n(k, \Gamma)}{\partial k} < \frac{\pi}{k' - k} \quad (11)$$

при условии, что $\varphi_N(k, \Gamma) = m\pi$, где m - любое целое число.

Было установлено [6], что для фазы φ_n , отсчитанной на окружности от 0 до π , устанавливается стационарное распределение при больших n . Корреляция между близкими по номеру φ_n и $\varphi_{n'}$ быстро убывает с ростом "расстояния" $|n - n'|$. Поэтому сумма в (11) подчиняется распределению Гаусса вида:

$$W(\Sigma) d\Sigma = A \exp \left\{ - \frac{(\Sigma - N \frac{\partial \bar{\Delta}}{\partial k})^2}{N \lambda^2} \right\}; \quad \lambda^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial \Delta_n}{\partial k} \frac{\partial \Delta_n}{\partial k}. \quad (12)$$

Здесь подразумевается средние по стационарным распределениям, как указано выше, A - нормировочная постоянная. Согласно (11) и (12), искомая вероятность имеет вид:

$$Q(k, k') dk' = A \exp \left\{ - \frac{\left(\frac{k' - k}{\Delta k} - 1 \right)^2}{N (k' - k)^2 \lambda^2} \right\} \frac{\pi}{(k' - k)^2} dk', \quad (13)$$

где $\overline{\Delta k} = [\nu(k)]^{-1}$ - среднее расстояние между соседними собственными значениями. Таким образом, распределение имеет гауссовский характер с узким пиком (ширины $\sim N^{-1/2}$) вблизи среднего значения.

Институт теоретической физики
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
4 июня 1966 г.

Литература

- [1] E.P. Wigner. *Ann. Math.*, 53, 36, 1951; 62, 548, 1955; 65, 203, 1957; 67, 325, 1958.
- [2] F.J. Dyson. *J. Math. Phys.*, 3, 140, 157, 166, 1962;
См. перевод в книге "Статистическая теория энергетических уровней сложных систем", Изд. иностр. лит., М., 1963.
- [3] R. Kubo. *J. Phys. Soc. Japan*, 17, 975, 1962.
- [4] Л.П. Горьков, Г.М. Элиашберг. *ЖЭТФ*, 48, 1407, 1965.
- [5] F.J. Dyson. *Phys. Rev.*, 92, 133, 1953.
- [6] H. Schmidt. *Phys. Rev.*, 105, 425, 1957.
- [7] H.L. Frish, S.P. Lloyd. *Phys. Rev.*, 120, 1175, 1960.
- [8] E.W. Montroll, R.B. Potts. *Phys. Rev.*, 100, 525, 1955.
- [9] И.М. Лифшиц. *Успехи физ. наук*, 83, 617, 1964.
- [10] Г.М. Заславский, В.Л. Покровский. *ЖЭТФ*, 51, вып. 8, 1966.
- [11] Ю.А. Бычков, А.М. Дыхне. *Письма ЖЭТФ*, 3, 313, 1966.