

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ОДНОМЕРНОЙ
МОДЕЛИ ЖИДКОСТИ*Г. М. Заславский, В. Л. Покровский*

Изучается энергетический спектр электрона в одномерной полностью неупорядоченной системе. Узлы решетки аппроксимируются δ -образными потенциальными барьерами. Расстояние между узлами является случайной функцией. Плотность вероятности расстояния между узлами предполагается экспоненциально убывающей с увеличением расстояния. Развита метод, позволяющий получить асимптотически точное выражение для плотности энергетического спектра вблизи края энергетической зоны.

Вопрос о структуре энергетического спектра электронов в жидкости (жидкий металл, диэлектрик и т. д.) представляет физический интерес. К сожалению, при решении его возникают большие математические трудности и кажется разумным исследование простейшей одномерной модели. Надежды связаны, в частности, с тем, что спектр одномерной модели кристалла обладает теми же основными чертами, что и спектр реального твердого тела (зонная структура, в особенности на краях зон). По-видимому, этим объясняется то обстоятельство, что изучению одномерных систем посвящено большое количество работ. В пионерской работе Дайсона [1] изучался спектр одномерной цепочки связанных осцилляторов. Хорошо известна связь этой проблемы с задачей о спектре электронов. Обширная литература посвящена также изучению влияния небольших искажений кристаллической решетки (или цепочки осцилляторов) на спектр (см. работы И. Лифшица [2], Монтролла и Потца [3], Шмидта [4]).

При исследовании одномерной модели жидкости, в сущности, имеют смысл два вопроса: 1) как расплывается дискретный уровень в узкую зону (этот вопрос, естественно, имеет смысл, когда расстояние между узлами больше радиуса связанных состояний); 2) какова структура края энергетической зоны. Первый вопрос в одномерном случае изучался в работе Фриша и Ллойда [5] и в трехмерном случае — в работах И. Лифшица [2]. Следует заметить, что как первый, так и второй вопрос исследовались в работах И. Лифшица [2] с экспоненциальной точностью для самых разнообразных ситуаций и произвольного числа измерений.

Основная идея состоит в следующем. Пусть, например, узлы «решетки» — это хаотически распределенные потенциальные барьеры. Для реализации состояния с энергией много меньшей средней потенциальной энергии барьеров необходимо, согласно принципу неопределенности, чтобы соседние узлы раздвинулись на расстояние в полдлины волны $\lambda/2$. При больших λ такая конфигурация является мало вероятной и оценка плотности энергетического спектра сводится к оценке вероятности такой флуктуации. При этом, однако, не учитывается квантовый эффект проникновения частицы в глубь потенциального барьера. В настоящей работе рассматривается ситуация, в которой этот эффект является существенным, и находится асимптотически точное выражение для энергетического спектра.

Мы представляем одномерную жидкость моделью хаотически расположенных потенциальных центров, на которых рассеиваются электроны.

В целях упрощения размер потенциальных центров считается много меньше длины волны электронов и среднего расстояния между центрами. Такие допущения позволяют записать потенциал в виде

$$V(x) = a \sum_k \delta(x - x_k); \quad a > 0.$$

Взаимодействие между потенциальными центрами x_k учитывается весьма упрощенно путем задания функции распределения расстояний $l_k = x_{k+1} - x_k$ между центрами $P(l_k)$. В такой постановке краю зоны соответствует область малых значений k .

§ 1. Основные уравнения и некоторые общие соотношения

Нашей задачей является нахождение средней плотности уровней уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left[k^2 - a \sum_i \delta(x - x_i) \right] \Psi = 0 \quad (1.1)$$

с граничными условиями

$$\Psi(0) = \Psi(x_{M+1}) = 0 \quad (1.2)$$

при заданном законе $P(l)$ распределения расстояния l между двумя ближайшими узлами. Мы подразумеваем усреднение по всем возможным конфигурациям $\{x_k\}$. Вследствие эргодичности определенная таким образом средняя плотность уровней совпадает с плотностью уровней достаточно длинной цепочки. Решение уравнения (1.1) в интервале (x_n, x_{n+1}) имеет вид

$$\Psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin [k(x - x_{n+1}) + \psi_{n+1}], \quad (1.3)$$

причем связь между фазами ψ_n, ψ_{n+1} определяется соотношением

$$\text{ctg}(\psi_{n+1} - l_n) = \text{ctg} \psi_n + \varepsilon, \quad (1.4)$$

где

$$l_n = k(x_{n+1} - x_n), \quad \varepsilon = a/k. \quad (1.5)$$

Обычно рассматривается система длиной L с последующим переходом $L \rightarrow \infty$. Мы же рассматриваем систему с заданным числом узлов $M + 1$. Физически эти задачи эквивалентны, так как вследствие закона больших чисел длина цепочек для подавляющего большинства конфигураций с огромной точностью равна

$$L = M\bar{l} = M/\gamma, \quad L, M \rightarrow \infty, \quad (1.6)$$

где $\bar{l} \equiv \gamma^{-1}$ — среднее расстояние между узлами, умноженное на k (см. (1.5)).

Число состояний $N_L(E) = N_L(k^2)$ с энергией, меньшей E , равно числу нулей волновой функции на длине L . Каждое возможное размещение δ -функций (т. е. точек x_i) на длине L определяет конфигурацию Γ и соответствующее ей число состояний $N_L(E, \Gamma)$. Число уровней с энергией, меньшей E , усредненное по всем конфигурациям Γ и взятое на единицу длины, равно

$$N(E) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \overline{N_L(E, \Gamma)}, \quad (1.7)$$

где черта означает усреднение по конфигурациям. В работе Шмидта [4] было показано, что $N(E)$ имеет конечный предел и может быть представ-

лено в виде

$$N(E) = \pi^{-1} \gamma \langle \psi_{n+1}(\psi_n) - \psi_n \rangle, \quad (1.8)$$

где угловые скобки означают усреднение по функции распределения $W(\psi_n)$ фазы ψ_n .

Формула (1.8) вытекает из следующих рассуждений. В соответствии с принятыми обозначениями фаза волновой функции в конце интервала длиной L , на котором разместилось M атомов с δ -функционным потенциалом, равна ψ_{M+1} . Из граничных условий (1.2) следует, что $\psi_{M+1} = m\pi$. Если условиться, что разность

$$|\psi_{n+1} - l_n - \psi_n| < \pi,$$

то число m и есть номер уровня для данной конфигурации. Число состояний $N_L(E, \Gamma)$, зависящее, естественно, от конфигурации Γ и от длины интервала, равно

$$N_L(E, \Gamma) = \frac{1}{\pi} \psi_{M+1} \equiv \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^M (\psi_{k+1} - \psi_k),$$

причем $\psi_{k+1} = \psi_{k+1}(\psi_k, l_k, E)$. При $M \rightarrow \infty$ в соответствии с законом больших чисел можно написать:

$$N_L(E, \Gamma) \approx \pi^{-1} M \langle \psi_{k+1}(\psi_k, l_k, E) - \psi_k \rangle.$$

где угловые скобки имеют тот же смысл, что и в формуле (1.8). Усредняя полученное выражение по всем конфигурациям Γ (т. е. по l_k), получаем после деления на L среднее число уровней на единицу длины:

$$N(E) = \frac{M}{\pi L} \langle \overline{\psi_{k+1}(\psi_k, l_k, E) - \psi_k} \rangle.$$

Если вспомнить теперь обозначение (1.6), то приходим в пределе к формуле (1.8). В сущности, при выводе мы уже предположили, что распределение $W(\psi_n)$ достигает стационарного значения, если воспринимать ψ_n как координату на окружности, и поэтому в формуле (1.8) следует считать n достаточно большим. Основная трудность в определении числа энергетических уровней при таком подходе переносится на определение функции распределения фаз $W(\psi)$.

Запишем вероятность того, что на n -ом шагу (т. е. после прохождения n δ -функций) фаза ψ_n лежит в интервале $(\psi_n, \psi_n + d\psi_n)$ в виде интегрального уравнения Смолуховского:

$$W_n(\psi_n) d\psi_n = \int W_{n-1}[\psi_{n-1}(\psi_n, l_n)] d[\psi_{n-1}(\psi_n, l_n)] P(l_n) dl_n. \quad (1.9)$$

В уравнении (1.9) связь между фазами ψ_{n-1} и ψ_n определяется условием (1.4). Для достаточно больших n , когда $W_n(\psi_n)$ стремится к своему стационарному значению, не зависящему от n , получаем интегро-функциональное уравнение [4]:

$$W(\psi) = \int dl W[\psi'(\psi, l)] \frac{d\psi'(\psi, l)}{d\psi} P(l), \quad (1.10)$$

$$\text{ctg}(\psi - l) = \text{ctg} \psi' + \varepsilon.$$

Решение уравнения (1.10) должно быть периодическим с периодом π , неотрицательным и удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^{\pi} W(\psi) d\psi = 1.$$

Существует еще одно простое соотношение, кроме формулы (1.8), связывающее функции распределения $W(\psi)$ и $P(l)$ с числом уровней. Это соотношение основано на непосредственном подсчете среднего числа нулей волновой функции на интервале между двумя узлами:

$$N(E) = \sum_{n=1}^{\infty} n \int_{n\pi}^{(n+1)\pi} d\psi \int_0^{\pi} d\eta \int_0^{\infty} dl W(\eta + l) P(l) P(\psi - \eta).$$

Для некоторых частных видов распределения $P(l)$ уравнение Шмидта (1.10) может быть сведено к дифференциально-разностному уравнению. Пусть вероятность того, что расстояние между двумя δ -функциями лежит в интервале $(l, l + dl)$, равна

$$P(l) dl = \gamma e^{-\gamma l} dl, \quad (1.11)$$

что соответствует пуассоновскому распределению точек x_i в уравнении Шредингера (1.1). Дифференцирование уравнения (1.10) по ψ дает

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dW(\psi)}{d\psi} = W[\psi'(\psi)] \frac{d\psi'(\psi)}{d\psi} - W(\psi), \quad (1.12)$$

где

$$\text{ctg } \psi'(\psi) = \text{ctg } \psi - \varepsilon, \quad (1.13)$$

или, вводя

$$\text{ctg } \psi = z, \quad V(z) dz = W(\psi) d\psi, \quad \int_{-\infty}^{\infty} V(z) dz = 1, \quad (1.14)$$

имеем⁴⁾

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1 + z^2) V(z)] = V(z) - V(z - \varepsilon). \quad (1.15)$$

Аналогично для распределений $P(l)$ типа

$$P(l) = A \sum_{k=1}^n e^{-\gamma_k l}, \quad P(l) = A l^n e^{-\gamma l} \quad (1.16)$$

можно получить для $W(\psi)$ дифференциальное уравнение n -го порядка со смещенными аргументами.

В Приложении 1 будет получено дифференциальное уравнение и решение изложенным выше методом для случая, когда величина потенциала $V(x)$ в уравнении Шредингера распределена по гауссовскому закону.

Перейдем к исследованию формулы (1.8) для числа состояний. В работе Фриша и Ллойда [5] для определения $N(E)$ в случае пуассоновского

⁴⁾ Это дифференциальное уравнение было получено Фришем и Ллойдом [5] другим путем и исследовалось в случае $\varepsilon < 0$.

распределения δ -функций методом Райса [6] было получено

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} z^2 V(z). \quad (1.17)$$

Результат (1.17) является весьма примечательным, так как позволяет после определения функции распределения фаз $W(\psi)$ сразу найти число состояний без каких-либо дополнительных операций усреднения, как это необходимо было бы при использовании выражения (1.8). Ниже будет показана связь между формулами (1.8) и (1.17). В действительности формула (1.17) справедлива не для любых распределений расстояний между атомами, однако для некоторых видов распределения $P(l)$ можно выразить число уровней $N(E)$ через распределение $V(z)$ и производные $V(z)$ при $z \rightarrow \pm\infty$, минуя неудобную операцию усреднения в (1.8).

Из второго выражения в (1.10) находим

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \psi - \psi' = l + \operatorname{arctg}[\operatorname{ctg} \psi' + \varepsilon] - \psi' = \\ &= l + \operatorname{arctg}[z + \varepsilon] - \operatorname{arctg} z, \quad z = \operatorname{ctg} \psi'. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Отсюда, согласно (1.8), получаем

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{1}{\pi} \gamma \langle \overline{\Delta\psi} \rangle = \frac{1}{\pi} \gamma \int_0^\infty P(l) dl + \\ &+ \frac{1}{\pi} \gamma \int_{-\infty}^\infty V(z) \{ \operatorname{arctg}(z + \varepsilon) - \operatorname{arctg} z \} dz \end{aligned}$$

или после замены переменных во втором интеграле и учета того, что γ^{-1} есть как раз среднее расстояние между соседними δ -функциями:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} + \frac{1}{\pi} \gamma \int_{-\infty}^\infty \operatorname{arctg} z \{ V(z - \varepsilon) - V(z) \} dz. \quad (1.19)$$

В случае пуассоновского распределения $P(l)$, воспользовавшись уравнением (1.15), получаем из (1.19)

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow -\infty} z^2 V(z)$$

и приходим к результату (1.17).

Аналогично можно получить удобные выражения для определения $N(E)$ для некоторых других типов распределения расстояний между δ -функциями (см. Приложение 2).

§ 2. Распределение Пуассона

Чтобы не усложнять основную идею решения лишними деталями, мы проведем его на конкретном примере распределения:

$$P(l) = l^{-1} e^{-l}, \quad (2.1)$$

для которого основное интегральное уравнение (1.10) сводится к дифференциально-разностному (1.15). К сожалению, мы не можем представить в явном виде решение уравнения (1.15). Самым тривиальным приближенным решением является решение в случае $\varepsilon \ll 1$, $\gamma \varepsilon \ll 1$. Оно получает-

ся путем разложения правой части (1.15) в ряд по ε до первой производной включительно и имеет вид

$$W(\psi) = C / (1 - \gamma\varepsilon \sin^2 \psi). \quad (2.2)$$

Решение (2.2) записано специально с преувеличенной точностью, так как в таком виде оно справедливо даже тогда, когда теория возмущений неприменима ($\varepsilon \ll 1$, $\gamma\varepsilon < 1$). Если $\gamma\varepsilon > 1$, в решении (2.2) формально появляются полюса, что говорит о неправомерности (2.2) в некотором интервале углов. Мы обсудим в деталях лишь случаи $\gamma\varepsilon \gg 1$, соответствующий дну зоны.

Предпошлем точному решению эвристический анализ. Из формулы (1.10) следует, что при всяком не малом ψ_n и малом \bar{l} величина ψ_{n+1} с подавляющей вероятностью меньше ψ_n . Поэтому если даже в результате маловероятной флуктуации угол ψ окажется не малым, то за несколько шагов он «скатится» в область малых ψ . При малых ψ формулу (1.10) можно приближенно записать в виде

$$\psi' - \psi = kl - \varepsilon\psi^2. \quad (2.3)$$

Из (2.3) следует, что в окрестности точки $\psi_0 = (k\bar{l}/\varepsilon)^{1/2}$ возникает неупорядоченное диффузионное движение фазы, приводящее к тому, что ψ_0 становится точкой максимума распределения $W(\psi)$. Мы вправе ожидать, что в основном фазовые точки на окружности будут сосредоточены вокруг малого $\psi_0 = (\bar{l}k/\varepsilon)^{1/2}$. Возникновению уровня соответствуют маловероятные скачки фазы на π (и больше), связанные с большими интервалами l ($kl > \pi$). Из условия (1.14) и уравнения (1.15) следует, что пределы $\lim z^2 V(z)$ при $z \rightarrow -\infty$ и $z \rightarrow +\infty$ совпадают, что, впрочем, очевидно, так как эти пределы имеют смысл $W(0)$. Максимум $V(z)$ лежит в точке $z_0 = \sqrt{\gamma\varepsilon} \gg 1$.

Начнем исследование решения $V(z)$ с окрестности точки максимума. Следует ожидать, что в окрестности этой точки $V(z - \varepsilon)$ можно разложить в ряд по ε , так как функция в окрестности экстремума изменяется слабо. В этом приближении уравнение (1.15) принимает вид

$$\frac{1}{2}\gamma\varepsilon^2 V''(z) + (z^2 - \gamma\varepsilon) V'(z) + 2zV(z) = 0 \quad (2.4)$$

(мы пренебрегли единицей по сравнению с z^2). Уравнение (2.4) имеет общее решение вида

$$V(z) = e^{\xi(z)} \left\{ A_+ + B_+ \int_{z_0}^z e^{-\xi(z)} dz \right\}, \quad \xi(z) \equiv \frac{2}{\gamma\varepsilon^2} \left(\gamma\varepsilon z - \frac{z^3}{3} \right), \quad (2.5)$$

где A_+ , B_+ — произвольные постоянные. Первое слагаемое соответствует ожидаемому острому максимуму шириной $|z - z_0| \sim \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ и ведет себя примерно как $\exp[-\alpha(z - z_0)^2]$. Второе слагаемое меняет знак в точке z_0 и ведет себя при $|z - z_0| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ как $(z^2 - \gamma\varepsilon)^{-1}$, так что постоянная A_+ должна быть достаточно большой и положительной величиной. Условие разложимости решения (2.4) в ряд по ε выполняется в области

$$|z - z_0| \ll \sqrt{\gamma\varepsilon}. \quad (2.6)$$

Аналогичное решение может быть получено в окрестности точки $-z_0$, но здесь мы запишем его для удобства в следующем виде:

$$V(z) = e^{\xi(z)} \left(A_- + B_- \int_{-\infty}^z e^{-\xi(z)} dz \right), \quad |z + z_0| \ll \sqrt{\gamma\varepsilon}. \quad (2.7)$$

Интегрирование в правой части (2.7) формально ведется по области, где решение (2.7) несправедливо. В действительности, однако, подынтегральное выражение имеет острый максимум в точке $-z_0$ шириной $|z + z_0| \sim \sim \gamma^{1/4}\epsilon^{3/4}$, так что основной вклад в интеграл дает «законная» область $|z + z_0| \ll \sqrt{\gamma\epsilon}$. В решении (2.7) первое слагаемое соответствует экспоненте, растущей по обе стороны точки $-z_0$, примерно как $e^{\alpha(z+z_0)^2}$, а второе ведет себя несколько более сложно: при $z_0 - z \gg \gamma^{1/4}\epsilon^{3/4}$ его можно аппроксимировать величиной $^{1/2}\gamma\epsilon^2 B_-(z^2 - \gamma\epsilon)^{-1}$, а при $z - z_0 \gg \gamma^{1/4}\epsilon^{3/4}$ — величиной

$$V(z) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \epsilon^{3/4} B_- \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\epsilon}} + \xi(z) \right\}. \quad (2.8)$$

Для того чтобы разобраться, во что переходят решения типа $A \exp \{ \xi(z) \}$ вне интервалов $|z \pm z_0| \ll \sqrt{\gamma\epsilon}$, применим модифицированный метод ВКБ. Будем искать решение в виде

$$V(z) = e^{S(z)}. \quad (2.9)$$

Смысл этой записи состоит в предположении того, что величину $V(z - \epsilon)$, вообще говоря, нельзя представлять в виде ряда по степеням ϵ и ограничиться лишь несколькими членами, тогда как для $S(z)$ это справедливо. Принимая это предположение и ограничиваясь для $S(z)$ лишь двумя членами разложения в ряд по ϵ , находим

$$z^2 S' + 2z = \gamma(1 - e^{-\epsilon S'}) - ^{1/2}\gamma\epsilon^2 S'' e^{-\epsilon S'}. \quad (2.10)$$

При выводе уравнения (2.10) из (1.15) предполагалось, что $z \gg 1$ и $\epsilon^2 S'' \ll 1$. Члены $2z$ и $^{1/2}\gamma\epsilon^2 S'' e^{-\epsilon S'}$ можно учесть по теории возмущений. Тогда в главном порядке по малой величине $(\sqrt{\gamma}/\epsilon)^{-1}$ уравнение (2.10) удобно записать в стандартной форме

$$x^2 \varphi_0(x) = 1 - e^{-\varphi_0(x)}, \quad (2.11)$$

где приняты обозначения

$$z = x \sqrt{\gamma\epsilon}, \quad \varphi(x) = +\epsilon S'(z). \quad (2.12)$$

Уравнение (2.11) определяет четную функцию $\varphi(x)$ (тривиальное решение $\varphi = 0$ мы отбросили). При x^2 , близком к единице, величина φ близка к нулю, и решение уравнения (2.11) можно записать в виде

$$\varphi(x) \approx 2(1 - x^2). \quad (2.13)$$

Для $V(z)$ в окрестности точек $z = \pm z_0$ получаем

$$V(z) = C \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\epsilon}} \int_{\pm 1}^x \varphi(x) dx \right\} = C_1 \exp \left\{ 2 \sqrt{\frac{\gamma}{\epsilon}} \left(x - \frac{x^3}{3} \right) \right\} = C_1 e^{\xi(z)}.$$

Таким образом, решения типа $A e^{\xi(z)}$ сшиваются с решениями вида

$$V(z) = C \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\epsilon}} \int_{\pm 1}^x \varphi(x) dx \right\}. \quad (2.14)$$

Выясняем область определения таких решений. Одно ограничение накладывается требованием

$$|\gamma\epsilon^2 S'' e^{-\epsilon S'}| \ll |\gamma(1 - e^{-\epsilon S'}) - z^2 S'|,$$

что приводит к неравенству

$$|z \pm z_0| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}. \quad (2.15)$$

Другое условие нам уже известно: $|z| \gg 1$.

Определим асимптотику $\varphi(x)$ при больших x . При $x^2 \gg 1$ можно пренебречь единицей в правой части (2.11) и получить приближенно

$$\varphi(x) \approx -\ln \{x^2 |\ln x^2|\}.$$

Подставляя найденную асимптотику в (2.14), обнаруживаем, что решения такого типа экспоненциально растут при $z \rightarrow -\infty$. Отсюда следует, что коэффициент A_- в решении (2.7) равен нулю. Таким образом, решение в окрестности точки $z = -z_0$ определено с точностью до множителя B_- .

Выясним, во что переходит решение

$$e^{\xi(z)} \int_{-\infty}^z e^{-\xi(z)} dz$$

при $z - z_0 \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$. В этом случае можно пренебречь членом со второй производной в уравнении (2.4) и получить

$$V(z) = B_- / (z^2 - \gamma \varepsilon). \quad (2.16)$$

Сопоставляя (2.16) с (1.17), видим, что коэффициент B_- совпадает с искомым числом уровней $N(E)$. Задача теперь состоит в том, чтобы выразить B_- через величину A_+ , определяющую в основном нормировку функции $V(z)$.

Мы уже знаем (см. (2.8)), что $V(z)$ в области $|z| \gg 1$, $|z + z_0| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ имеет вид

$$V(z) = C_- \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_{-1}^x \varphi(x) dx \right\},$$

$$C_- = 2\sqrt{\pi} B_- \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}, \quad (2.17)$$

где $\varphi = \varphi_0 + \varphi_1$, $\varphi_0(x)$ определяется уравнением (2.11), а φ_1 имеет вид

$$\varphi_1(x) = -\sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} \frac{2x + 1/2 \varphi_0' e^{-\varphi_0}}{x^2 - e^{-\varphi_0}}. \quad (2.18)$$

Отметим, что при $|x| \ll 1$ член $e^{-\varphi_0}$ в правой части уравнения (2.11) пренебрежимо мал. Поэтому кажется естественным в области $|x| \ll 1$ пренебречь членом $V(z - \varepsilon)$ в правой части уравнения (1.15) что будет оправдано. Решая получающееся в таком приближении дифференциальное уравнение, получаем

$$V(z) = D \frac{e^{\gamma \arctg z}}{1 + z^2}. \quad (2.19)$$

Это решение в области $1 \ll |z| \ll \sqrt{\gamma \varepsilon}$ ($z < 0$) должно перейти в (2.17), для чего необходимо

$$D e^{-\gamma \pi/2} = C_- \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_{-1}^0 \left(\varphi(x) - \frac{1}{x^2} + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} \frac{1}{x} \right) dx \right\}. \quad (2.20)$$

Решение в области $z \gg 1$, $z_0 - z \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ переходит в функцию типа (2.17):

$$V(z) = C_+ \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_1^z \varphi(x) dx \right\}. \quad (2.21)$$

Связь между D и C_+ аналогична (2.20):

$$De^{1/2\gamma\pi} = C_+ \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_1^0 \left(\varphi(x) - \frac{1}{x^2} - 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} \frac{1}{x} \right) dx \right\} \quad (2.22)$$

(φ определяется по-прежнему). Наконец, решение (2.22) переходит в решение (2.5), причем связь между C_+ и A_+ имеет вид

$$C_+ \exp \left\{ -\frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \right\} = A_+. \quad (2.23)$$

Теперь мы в состоянии написать уравнение, связывающее B_- с A_+ :

$$B_- = (2\sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4})^{-1} \exp \left\{ -\gamma\pi - \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_{-1}^1 \left(\varphi_0(x) - \frac{1}{x^2} \right) dx - \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \right\} A_+. \quad (2.24)$$

Определим A_+ из условия нормировки:

$$A_+ \approx \left[\int e^{\xi(z)} dz \right]^{-1} \approx \left[2\sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4} \exp \left(\frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \right) \right]^{-1}. \quad (2.25)$$

Отсюда

$$N(k^2) \approx \frac{1}{2} k \gamma \varepsilon^2 B_- = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{a}{\bar{l}}} \exp \left\{ -\frac{\pi}{k\bar{l}} + \frac{1}{\sqrt{a\bar{l}}} \int_{-1}^{+1} \left(\frac{1}{x^2} - \varphi_0(x) \right) dx \right\}. \quad (2.26)$$

По ходу дела нам пришлось ввести еще одно ограничение $\varepsilon \ll \gamma$ (см. (2.10), (2.11), (2.18)). Однако это ограничение не является существенным. Его легко снять, заменив функцию $\varphi_0(x)$ в интеграле (2.26) более сложной функцией, вычисленной с помощью обыкновенного дифференциального уравнения:

$$x^2 \varphi + 2\sqrt{\varepsilon/\gamma} x = 1 - e^{-\varphi} (1 + 1/2 \sqrt{\varepsilon/\gamma} \varphi').$$

Величина $N(E)$ и, следовательно, dN/dE , пропорциональна экспоненте $e^{-\pi/k\bar{l}}$. Этот результат легко истолковать с физической точки зрения. Когда длина волны частицы λ много больше среднего расстояния между соседними центрами \bar{l} , средняя энергия ее становится порядка a/\bar{l} . Энергия $k^2 \ll a/\bar{l}$ ($\varepsilon\gamma \gg 1$) может получиться лишь в тех конфигурациях или на том участке цепочки, где соседние узлы раздвинулись на расстояние порядка $\lambda/2$, чтобы вместить, по крайней мере, один узел волновой функции. Так как вероятность $P(\bar{l}) = \bar{l}^{-1} e^{-\bar{l}/\lambda}$, то статистический вес таких

состояний должен быть пропорционален $e^{-\lambda/2\bar{l}} = e^{-\pi/k\bar{l}}$. Разумеется, множитель π в показателе не следует из наших нестрогих рассуждений.

Эти рассуждения можно уточнить, учтя конечность высоты стенок ямы²⁾. Тогда волновая функция электрона не локализуется точно в яме, а «просачивается» на глубину

$$\delta \sim \left\{ \frac{1}{\bar{l}} \int_0^{\bar{l}} V(x) dx \right\}^{-1/2} \sim \left(\frac{a}{\bar{l}} \right)^{-1/2}.$$

Таким образом, для образования маловероятного состояния с $\lambda \gg \bar{l}$ необходимо, чтобы соседние узлы раздвинулись на расстояние $\sim \lambda/2 - 2\delta$. Вероятность такой флуктуации порядка

$$\exp \left\{ -\frac{\lambda}{2\bar{l}} + \frac{2\delta}{\bar{l}} \right\} = \exp \left\{ -\frac{\pi}{k\bar{l}} + \frac{2}{\sqrt{a\bar{l}}} \right\}, \quad (2.27)$$

в соответствии с (2.26). При выводе (2.27), естественно, подразумевается, что $\delta \gg \bar{l}$. Это эквивалентно неравенству $\gamma \gg \varepsilon$, использованному при выводе (2.26). Коэффициент (порядка единицы) при члене δ/\bar{l} связан с некоторым эффективным размытием краев ямы, существенно зависящим от вида распределения расстояния между узлами и, конечно, не может быть установлен из подобного рода рассуждений.

§ 3. Функция корреляции соседних узлов $P(l)$ произвольна

По-прежнему предполагаем, что $E \ll \bar{V}$ ($\varepsilon\gamma \gg 1$). Решение общего уравнения (1.10) в том случае, когда $P(l)$ при больших l убывает быстрее, чем любая степень l^{-n} , можно получить аналогичным способом. В областях $|z^2 - z_0^2| \ll \gamma\varepsilon$ функцию $V(z')$ в интеграле можно разложить по степеням разности $z' - z$. Получаемое дифференциальное уравнение отличается от (2.4) лишним множителем α при $V''(z)$, где

$$\alpha = (\bar{l}^2 - l^2) / \bar{l}^2. \quad (3.1)$$

Не повторяя рассуждений § 2, напомним решение $V(z)$ в окрестности точки $-z_0$ в виде

$$V(z) = B_- e^{\xi(z)/\alpha} \int_{-\infty}^z e^{-\xi(z)/\alpha} dz. \quad (3.2)$$

В области $|z + z_0| \gg \gamma^{1/4}\varepsilon^{3/4}$, $z \gg 1$ хорошей аппроксимацией для $V(z)$ является выражение

$$V(z) = C_- \exp \left\{ \sqrt{\frac{\bar{V}}{\varepsilon}} \int_{-1}^x \varphi(x) dx \right\}, \quad C_- = 2B_- \sqrt{\alpha\bar{l}} \gamma^{1/4}\varepsilon^{3/4}, \quad (3.3)$$

²⁾ Этим замечанием авторы обязаны Ю. А. Бычкову и А. М. Дыхне.

где $\varphi(x)$ подчиняется уравнению

$$\varphi = \varphi_0 + \varphi_1, \quad e^{\varphi_0} = \hat{P}(-\varphi_0 x^2), \quad (3.4)$$

$$\varphi_1 = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} [x^2 \hat{P}'(-\varphi_0 x^2) - \hat{P}(-\varphi_0 x^2)]^{-1} \left\{ x \hat{P}'(-\varphi_0 x^2) + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \frac{d\varphi_0}{dx} [\hat{P}(-\varphi_0 x^2) - 2x^2 \hat{P}'(-\varphi_0 x^2) + x^4 \hat{P}''(-\varphi_0 x^2)] \right\};$$

$$\hat{P}(v) = \int e^{-v i l} \bar{P}(l) dl, \quad \hat{P}'(v) = \frac{d\hat{P}(v)}{dv}.$$

В области $x \ll 1$ удобнее иметь дело с $W(\psi)$ и использовать первоначальное уравнение (1.10). Основной вклад в интеграл дает область максимума $|\psi - \psi_0| \sim \varepsilon^{-1/4} \gamma^{-3/4}$. Связь между ψ , ψ' и l при малых ψ' можно приближенно записать в виде

$$\psi' = \psi + k(\bar{l} - l).$$

Это означает, что в существенной области интегрирования в уравнении (1.10) выполняется равенство $kl \approx \psi$. Предполагая, что при больших $l \gg \bar{l}$ распределение $P(l)$ имеет асимптотику $P(l) \sim e^{-\tilde{\gamma}hl}$, получим в области $x \ll 1$ решение вида

$$W(\psi) = D e^{-\tilde{\gamma}\psi}. \quad (3.5)$$

Сшивая (3.5) с (3.3), получаем

$$e^{-\tilde{\gamma}\pi D} = C \cdot \exp \left\{ \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_{-1}^0 \left(\varphi(x) - \frac{\tilde{\gamma}}{\gamma} \frac{1}{x^2} \right) dx + \frac{\tilde{\gamma}}{\sqrt{\gamma\varepsilon}} \right\}.$$

Аналогичным образом проводим сшивку дальше и находим окончательно:

$$N(k^2) = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{a}{l}} \exp \left\{ -\pi\tilde{\gamma} + \frac{1}{\sqrt{a\bar{l}}} \int_{-1}^1 \left(\frac{\tilde{\gamma}}{\gamma x^2} - \varphi_0(x) \right) dx \right\}. \quad (3.6)$$

Очевидно, что физический смысл полученного результата тот же, что и в предыдущем параграфе.

Следует заметить, что если примеси находятся близко друг от друга, то между ними возникает взаимодействие и при $l < \bar{l}$ появляется отклонение от пуассоновского закона. Таким образом, взаимодействие примесей на близких расстояниях влияет на вид $\varphi_0(x)$ и существенно сказывается на втором слагаемом в экспоненте (3.6).

Мы видим, что структура края зоны определяется асимптотикой $P(l)$ для больших $l \gg \lambda$. В частности, для распределения Гаусса плотность уровней дна зоны выглядит совершенно иначе: $N(E) \sim e^{-A/h^2}$, где A — постоянная. Таким образом, универсального ответа на поставленный вопрос не существует. Наоборот, зная плотность уровней на краю зоны, мы можем судить о характере функции распределения расстояний между узлами.

Выражаем благодарность А. З. Паташинскому за полезную дискуссию.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

Движению электрона в случайном поле $V(x)$ посвящен ряд работ (см., например, [7, 8]). Для величины поля $V(x)$ принимается гауссовское распределение:

$$\langle V(x) \rangle = 0, \quad \langle V(x)V(x') \rangle = V_0^2 \delta(x - x'). \quad (\text{П1.1})$$

Покажем, как развитый в работе метод сразу приводит к решению задачи о спектре электрона в поле (П1.1).

Пусть в уравнении (1.1) коэффициент a зависит от номера i и может принимать два значения: $\pm a$ ($a > 0$) с вероятностью $1/2$ каждое. Тогда вместо (1.10) имеем

$$W(\psi) = \frac{1}{2} \int dP(l) \left\{ W(\psi'(\psi, l)) \frac{d\psi'(\psi, l)}{d\psi} + W(\psi''(\psi, l)) \frac{d\psi''(\psi, l)}{d\psi} \right\}, \quad (\text{П1.2})$$

где

$$\text{ctg } \psi' = \text{ctg } (\psi - l) - \varepsilon, \quad \text{ctg } \psi'' = \text{ctg } (\psi - l) + \varepsilon. \quad (\text{П1.3})$$

Аналогично тому, как выводилось уравнение (1.15), получаем

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1 + z^2)V(z)] = V(z) - \frac{1}{2} \{V(z - \varepsilon) + V(z + \varepsilon)\}. \quad (\text{П1.4})$$

Если теперь сделать предельный переход

$$\varepsilon \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow \infty, \quad \varepsilon^2 \gamma = \text{const} = 1/2 V_0^2, \quad (\text{П1.5})$$

то распределение величины $V(x)$ переходит в гауссовское распределение (П1.1) [9]. Разлагая теперь в (П1.4) $V(z \pm \varepsilon)$ в ряд по ε и совершая переход (П1.5), получим

$$\frac{d}{dz} [(1 + z^2)V(z)] + \frac{1}{2} V_0^2 \frac{d^2 V}{dz^2} = 0. \quad (\text{П1.6})$$

Уравнение (1.19) для числа состояний $N(E)$ в рассматриваемом случае принимает вид

$$N(E) = \frac{1}{\pi} + \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{arcctg } z \left\{ \frac{1}{2} V(z - \varepsilon) + \frac{1}{2} V(z + \varepsilon) - V(z) \right\} dz. \quad (\text{П1.7})$$

Подстановка (П1.4) в (П1.7) приводит к

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow -\infty} z^2 V(z).$$

Уравнение (П1.6) для $V(z)$ легко решается, и число состояний $N(E)$ может быть выражено через функции Эйри [10].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Пусть задано

$$P(l) = \gamma^2 l e^{-\gamma l}, \quad \int_0^{\infty} P(l) dl = 1, \quad \bar{l} = \frac{2}{\gamma}. \quad (\text{П2.1})$$

Двукратным дифференцированием уравнения (1.10) по ψ аналогично выводу уравнения (1.15) находим

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dz} \left\{ (1+z^2) \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] \right\} = \\ & = 2\gamma \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] + \gamma^2 [V(z-\varepsilon) - V(z)]. \end{aligned} \quad (\text{П2.2})$$

Подстановка (П2.2) в (1.19) дает

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \left\{ z^2 V(z) - \frac{1}{2\gamma} z^2 \frac{d}{dz} (z^2 V) \right\}. \quad (\text{П2.3})$$

Полученный результат показывает, что формула (1.17) не является универсальной.

Новосибирский государственный
университет

Поступила в редакцию
18 января 1966 г.

Литература

- [1] F. J. Dyson. Phys. Rev., 92, 1339, 1953.
- [2] И. М. Ли́фшиц. УФН, 83, 617, 1964.
- [3] E. W. Montroll, R. B. Potts. Phys. Rev., 102, 72, 1956.
- [4] H. Schmidt. Phys. Rev., 105, 425, 1957.
- [5] H. L. Frish, S. P. Lloyd. Phys. Rev., 120, 1175, 1960.
- [6] S. O. Rice. Bell System Tech. J., 23, 282, 1944.
- [7] S. F. Edwards. Proc. Phys. Soc., 85, part 1, 543, 1965.
- [8] И. В. Андреев. ЖЭТФ, 48, 1437, 1965.
- [9] M. A. Leibowitz. J. Math. Phys., 4, 852, 1963.
- [10] B. I. Halperin. Phys. Rev., 139, 104A, 1965.

ELECTRON ENERGY SPECTRUM IN A ONE-DIMENSIONAL FLUID MODEL

G. M. Zaslavsky, V. L. Pokrovsky

The energy spectrum of an electron in a one-dimensional completely disordered system is studied. The lattice nodes are approximated by δ -like potential barriers. The distance between the nodes is a random function. The density of the probability of the distance between the nodes is assumed to be an exponentially decreasing function of the distance. A method is developed for obtaining an asymptotically exact expression for the density of the energy spectrum near the edge of the energy band.