

препринт 8

Г.М.Заславский. В.Л.Покровский

**Об энергетическом спектре электронов
в одномерной модели жидкости**

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, 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.М.Лифшица, [2]; Монролла и Поца [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.М.Лифшица [2]. Настоящая работа посвящена исследованию второго вопроса.

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 край зоны соответствует область малых значений k .

§ I. Основные уравнения и некоторые общие соотношения

Нашей задачей является нахождение средней плотности уров-

ней уравнения Шредингера:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + [k^2 - a \sum_i \delta(x-x_i)] \Psi = 0 \quad (I.1)$$

с граничными условиями

$$\Psi(0) = \Psi(x_{M+1}) = 0 \quad (I.2)$$

при заданном законе $P(\ell)$ распределения расстояний 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 (I.1) в интервале (x_n, x_{n+1}) имеет вид:

$$\Psi_{n+1}(x) = A_{n+1} \sin [k(x-x_{n+1}) + \psi_{n+1}] \quad (I.3)$$

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

$$\text{ctg}(\psi_{n+1} - \ell) = \text{ctg} \psi_n + \varepsilon \quad (I.4)$$

где

$$\ell_n = k(x_{n+1} - x_n); \quad \varepsilon = a/k \quad (I.5)$$

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, т.к. вследствие закона больших чисел длина цепочек для подавляющего большинства конфигураций с огромной точностью равна:

$$L = M \bar{\ell} = M/\gamma; \quad L, M \rightarrow \infty \quad (I.6)$$

где $\bar{\ell} \equiv \gamma^{-1}$ - среднее расстояние между узлами (в единицах k - см. (I.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_k) на длине L определяет конфигурацию Γ и соответствующее ей число состояний $N_L(E, \Gamma)$. Число уровней с энергией $< E$, усредненное по всем

2.

конфигурациям Γ и взятое на единицу длины, равно

$$N(E) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \overline{N_L(E, \Gamma)} \quad (I.7)$$

где черта означает усреднение по конфигурациям. В работе Шмидт [4] было показано, что $N(E)$ имеет конечный предел и может быть представлено в виде:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \gamma \overline{\langle \psi_{n+1}(\psi_n) - \psi_n \rangle} \quad (I.8)$$

где угловые скобки означают усреднение по функции распределения $w(\psi_n)$ фазы ψ_n . Формула (I.8) вытекает из следующих рассуждений. В соответствии с принятыми обозначениями фаза волновой функции в конце интервала длиной L , на котором разместились M атомов с δ -функциональным потенциалом, равна ψ_{M+1} . Из граничных условий (I.2) следует, что $\psi_{M+1} = m\pi$. Если уловится, что разность

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

то число m и есть номер уровня для данной конфигурации. Число состояний $N_L(E, \Gamma)$, зависящее, естественно, от конфигурации 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 $\psi_{k+1} = \psi_{k+1}(\psi_k, \ell_k, E)$. При $M \rightarrow \infty$ в соответствии с законом больших чисел можно написать:

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

где угловые скобки имеют тот же смысл, что и в формуле (I.8). Усредняя полученное выражение по всем конфигурациям Γ (т.е. по ℓ_k), получаем после деления на L среднее число уровней на единицу длины:

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

Если вспомнить теперь обозначение (I.6), то приходим в пределе к формуле (I.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 (I.8) следует считать n достаточно большим. Основная трудность в определении числа энергетических уровней при таком подходе переносится на определение функции распределения фаз $w(\psi)$.

3.

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:

$$w_n(\psi_n) d\psi_n = \int w_{n-1}[\psi_{n-1}(\psi_n, \ell_n)] d[\psi_{n-1}(\psi_n, \ell_n)] \times P(\ell_n) d\ell_n \quad (I.9)$$

В уравнении (I.9) связь между фазами ψ_{n-1} и ψ_n определяется условием (I.4). Для достаточно больших n , когда $w_n(\psi_n)$ стремится к своему стационарному значению, не зависящему от n , получаем интегро-функциональное уравнение [4]:

$$w(\psi) = \int d\ell w[\psi'(\psi, \ell)] \frac{d\psi'(\psi, \ell)}{d\psi} P(\ell) \quad (I.10)$$

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

Решение уравнения (I.10) должно быть периодическим с периодом π , неотрицательным и удовлетворять условию нормировки

$$\int_0^\pi w(\psi) d\psi = 1$$

Существует ещё одно простое соотношение, кроме формулы (I.8), связывающее функции распределения $w(\psi)$ и $P(\ell)$ с числом уровней. Это соотношение основано на непосредственном подсчете среднего числа нулей волновой функции на интервале между двумя узлами:

$$N(E) = \sum_{n=1}^{\infty} n \int_{n\pi}^{(n+1)\pi} d\psi \int_0^\pi d\eta \int_0^\infty d\ell w(\eta + \ell) P(\ell) P(\psi - \eta)$$

Для некоторых частных видов распределения $P(\ell)$ уравнение Шмидта (I.10) может быть сведено к дифференциально-разностному уравнению. Пусть вероятность того, что расстояние между двумя δ -функциями лежит в интервале $(\ell, \ell + d\ell)$, равна:

$$P(\ell) d\ell = \gamma e^{-\gamma\ell} d\ell \quad (I.11)$$

что соответствует пуассоновскому распределению точек X_i в уравнении Шредингера (I.1). Дифференцирование уравнения (I.10) по ψ

даёт:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{dw(\psi)}{d\psi} = w[\psi'(\psi)] \frac{d\psi'(\psi)}{d\psi} - w(\psi) \quad (I.12)$$

где

$$\text{ctg}\psi'(\psi) = \text{ctg}\psi - \varepsilon \quad (I.13)$$

или, вводя

$$\text{ctg}\psi = z, \quad V(z) dz = w(\psi) d\psi; \quad \int_{-\infty}^{\infty} V(z) dz = 1 \quad (I.14)$$

имеем^{*)}

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] = V(z) - V(z-\varepsilon) \quad (I.15)$$

Аналогично для распределений $P(\ell)$ типа

$$P(\ell) = A \sum_{k=1}^n e^{-\gamma\ell}; \quad P(\ell) = A \ell^n e^{-\gamma\ell} \quad (I.16)$$

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

В приложении I 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 (I.8) для числа состояний. В работе [5] для определения $N(E)$ в случае пуассоновского распределения δ -функций методом Райса [6] было получено:

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow \pm\infty} z^2 V(z) \quad (I.17)$$

Результат (I.17) является весьма примечательным, т.к. 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 (I.8). Ниже будет показана связь между формулами (I.8) и (I.17). В действительности формула (I.17) справедлива не для любых распределений

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

ний расстояний между атомами, однако для некоторых видов распределения $P(\ell)$ можно выразить число уровней $N(E)$ через распределение $V(z)$ и производные $V'(z)$ при $z \rightarrow \pm \infty$, минуя неудобную операцию усреднения в (I.8).

Из второго выражения в (I.10) находим:

$$\begin{aligned} \Delta\psi &= \psi - \psi' = \ell + \arcsctg [\operatorname{ctg} \psi' + \varepsilon] - \psi' = \\ &= \ell + \arcsctg(z + \varepsilon) - \arcsctg z; \quad z = \operatorname{ctg} \psi' \end{aligned} \quad (\text{I.18})$$

Отсюда, согласно (I.8), получаем:

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

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

$$N(E) = \frac{1}{\pi} + \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \arcsctg z \{ V(z - \varepsilon) - V(z) \} dz \quad (\text{I.19})$$

В случае пуассоновского распределения $P(\ell)$, воспользовавшись уравнением (I.15), получаем из (I.19):

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

и мы приходим к результату (I.17).

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

§ 2. Распределение Пуассона

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

$$P(\ell) = \frac{1}{\bar{\ell}} e^{-\ell/\bar{\ell}} \quad (\text{2.1})$$

для которого основное интегральное уравнение (I.10) сводится к

дифференциально-разностному (I.15). К сожалению, мы не можем представить в явном виде решение уравнения (I.15). Самым тривиальным приближенным решением является решение в случае $\varepsilon \ll 1$, $\gamma\varepsilon \ll 1$. Оно получается путем разложения правой части (I.15) в ряд по ε до первой производной включительно и имеет вид:

$$w(\psi) = \frac{C}{1 - \gamma\varepsilon \sin^2 \psi} \quad (\text{2.2})$$

Решение (I) записано специально с преувеличенной точностью, т.к. в таком виде оно справедливо даже тогда, когда теория возмущений неприменима ($\varepsilon \ll 1$, $\gamma\varepsilon < 1$). Если $\gamma\varepsilon > 1$, в решении (I) формально появляются полюса, что говорит о некорректности (2.1) в некотором интервале углов. Мы обсудим в деталях лишь случай $\gamma\varepsilon \gg 1$, соответствующий дну зоны.

Предположим точному решению эвристический анализ. Из формулы (I.10) следует, что при всяком не малом ψ_n и малом $\bar{\ell}$ 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 (I.10) можно приближенно записать в виде:

$$\psi' - \psi = \kappa \bar{\ell} - \varepsilon \psi^2 \quad (\text{2.3})$$

Из (2.3) следует, что в окрестности точки $\psi_0 = (\kappa \bar{\ell} / \varepsilon)^{1/2}$ 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 $\psi_0 = (\kappa \bar{\ell} / \varepsilon)^{1/2}$. Возникновению уровня соответствуют маловероятные скачки фазы на π и больше, связанные с большими интервалами ℓ ($\kappa \ell > \pi$). Из условия (I.14) и уравнения (I.15) следует, что два предела $\lim_{z \rightarrow -\infty} z^2 V(z)$, $\lim_{z \rightarrow +\infty} z^2 V(z)$ совпадают, что, впрочем, очевидно, так как эти пределы имеют смысл $w(0)$. Максимум $V(z)$ лежит в точке $z_0 = \sqrt{\gamma\varepsilon} \gg 1$. Начнём исследование решения $V(z)$ с окрестности точки максимума. Следует ожидать, что в окрестности этой точки $V(z - \varepsilon)$ можно разложить в ряд по ε , т.к. функция в окрестности экстремума изменяется слабо. В этом приближении уравнение (I.15) прини-

мает вид:

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

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

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

где A_+ , B_+ — произвольные постоянные. Первое слагаемое соответствует ожидаемому острому максимуму ширины $|z - z_0| \sim \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ и ведёт себя примерно как $e^{-\alpha(z-z_0)^2}$. Второе слагаемое меняет знак в точке z_0 и ведёт 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:

$$V(z) = e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)} \left\{ A_- + B_- \int_{-\infty}^z e^{-\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)} dz \right\} \quad (2.7)$$

Интегрирование в правой части (2.7) формально по области, где решение (2.7) несправедливо. В действительности, однако, подинтегральное выражение имеет острый максимум в точке $-z_0$ ширины $|z + z_0| \sim \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$, так что основной вклад в интеграл даёт "законная" область $|z + z_0| \ll \sqrt{\gamma \varepsilon}$. 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 ведёт себя несколько более сложно: при $|z_0 - z| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ его можно аппроксимировать величиной $\frac{1}{2} \gamma \varepsilon^2 B_- (z^2 - \gamma \varepsilon)^{-1}$, а при $z - z_0 \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ — величиной

$$V(z) \approx \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4} B_- e^{-\frac{4}{3} \sqrt{\gamma} \frac{z}{\varepsilon}} e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)} \quad (2.8)$$

Для того, чтобы разобратся, во что переходят решения типа $A e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)}$ вне интервалов $|z \pm z_0| \ll \sqrt{\gamma \varepsilon}$ применим модифицированный метод WKВ. Будем искать решение в виде:

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

Смысл этой записи состоит в предположении о том, что величину $V(z - \varepsilon)$, 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:

$$z^2 S' + 2z = \gamma (1 - e^{-\varepsilon S'}) - \frac{1}{2} \gamma \varepsilon^2 S'' e^{-\varepsilon S'} \quad (2.10)$$

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

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

где приняты обозначения:

$$z = x \sqrt{\gamma \varepsilon}; \quad \varphi(x) = -\varepsilon S'(z) \quad (2.12)$$

Уравнение (2.11) определяет чётную функцию $\varphi(x)$ (тривиальное решение $\varphi = 0$ мы отбросили). При x^2 , близком к 1, 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:

$$V(z) = C e^{\frac{\sqrt{\gamma}}{\varepsilon} \int_{\pm 1}^x \varphi(x) dx} = C_1 e^{2\frac{\sqrt{\gamma}}{\varepsilon} (x - x^3/3)} = C_1 e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)}$$

Таким образом, решения типа $A e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)}$ свиваются с решениями вида

$$V(z) = C e^{\frac{\sqrt{\gamma}}{\varepsilon} \int_{\pm 1}^x \varphi(x) dx} \quad (2.14)$$

Выясняем область определения таких решений. Одно ограничение накладывается требованием $|\gamma \varepsilon^2 S'' e^{-\varepsilon S'}| \ll |\gamma (1 - e^{-\varepsilon S'}) - \varepsilon^2 S'|$, 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

$$e^{\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{2}{\gamma \varepsilon^2} (\gamma \varepsilon z - z^3/3)} dz$$

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:

$$V(z) = \frac{B_-}{z^2 - \gamma \varepsilon} \quad (2.16)$$

Сопоставляя (2.16) с (1.17) видим, что коэффициент B_- совпадает с искомым числом уровней $N(\varepsilon)$. 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 $|z| \gg 1$, $|z \pm z_0| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$ имеет вид:

$$V(z) = C_- e^{\int_{-1}^x \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \varphi(x) dx}; \quad C_- = B_- \cdot 2\sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4} \quad (2.17)$$

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

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

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:

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

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):

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

Связь между D и C_+ аналогична (2.20):

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

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

$$C_+ e^{-\frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}}} = A_+ \quad (2.23)$$

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

$$B_- = (2\sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4})^{-1} e^{-\gamma \pi - \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int_{-1}^0 \left[\varphi_0(x) - \frac{1}{x^2} \right] dx} + \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} A_+ \quad (2.24)$$

Определим теперь A_+ из условия нормировки:

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

Отсюда $N(k^2) = \frac{k}{2} \gamma \varepsilon^2 B_- = \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{a}{\varepsilon}} e^{-\frac{\pi}{k\varepsilon} - \frac{1}{\sqrt{a\varepsilon}} \int_{-1}^1 \left(\varphi_0(x) - \frac{1}{x^2} \right) dx}$ (2.26)

По ходу дела нам пришлось ввести ещё одно ограничение $\varepsilon/\gamma \ll 1$. (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, вычислимой с помощью обыкновенного дифференциального уравнения:

$$x^2 \varphi + 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} x = 1 - e^{-\varphi} \left(1 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} \varphi'\right)$$

Величина $N(E)$ и, следовательно dN/dE , пропорциональна экспоненте $e^{-\pi/k\bar{e}}$. Этот результат легко истолковать с физической точки зрения. Когда длина волны частицы λ много больше среднего расстояния между соседними центрами \bar{e} , средняя энергия её становится порядка a/\bar{e} . Энергия $k^2 \ll a/\bar{e}$ ($\varepsilon\gamma \gg 1$) 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 $P(\ell) = \bar{e}^{-1} e^{-\ell/\bar{e}}$, то статистический вес таких состояний должен быть пропорционален $e^{-\lambda/2\bar{e}} \sim e^{-\pi/k\bar{e}}$. Разумеется множитель π в показателе не следует из наших нестрогих рассуждений.

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

По-прежнему предполагаем, что $E \ll \bar{V}$ ($\varepsilon\gamma \gg 1$). Решение общего уравнения (1.10) в том случае, когда $P(\ell)$ при больших ℓ убывает быстрее, чем любая степень ℓ^{-n} , можно получить аналогичным способом. В областях $|\tau^2 - \tau_0^2| \gg \gamma\varepsilon$ функцию $V(\tau')$ в интеграле можно разложить по степеням разности $\tau' - \tau$. Получаемое дифференциальное уравнение отличается от (2.4) лишним множителем α при $V''(\tau)$, где

$$\alpha = \frac{\ell^2 - \bar{e}^2}{\bar{e}^2} \quad (3.1)$$

Не повторяя рассуждений § 2, напомним решение $V(\tau)$ в окрестности точки $-\tau_0$ в виде:

$$V(\tau) = B_- e^{\frac{2}{\alpha\gamma\varepsilon^2} (\gamma\varepsilon\tau - \tau^3/3)} \int_{-\infty}^{\tau} e^{-\frac{2}{\alpha\gamma\varepsilon^2} (\gamma\varepsilon z - z^3/3)} dz \quad (3.2)$$

В области $|\tau - \tau_0| \gg \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4}$, $\tau \gg 1$ хорошей аппроксимацией для $V(\tau)$ является выражение:

$$V(\tau) = C_- e^{-\sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \int^{\tau} \varphi(x) dx}; \quad C_- = B_- 2\sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4} e^{\frac{1}{3\alpha} \sqrt{\frac{\gamma}{\varepsilon}} \sqrt{\alpha}}, \quad (3.3)$$

где $\varphi(x)$ подчиняется уравнению:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_0 + \varphi_1; & e^{-\varphi_0} &= \hat{P}(\varphi_0 x^2) \\ \varphi_1 &= \sqrt{\frac{\varepsilon}{\gamma}} \frac{1}{\hat{P}'(\varphi_0 x^2)} \left[- (1 - 2x \hat{P}' + x^2 \hat{P}'') \varphi' + 2x \hat{P}' \right] & (3.4) \\ \hat{P}(\alpha) &= \frac{1}{\bar{e}} \int e^{-\alpha \ell/\bar{e}} P(\ell) d\ell; & \hat{P}'(\alpha) &= \frac{d\hat{P}}{d\alpha} \end{aligned}$$

В области $x \ll 1$ удобнее иметь дело с $W(\psi)$ и использовать первоначальное уравнение (1.10). Основной вклад в интеграл даёт область максимума $|\psi - \psi_0| \sim \varepsilon^{-1/4} \gamma^{-3/4}$. Вблизи максимума $W(\psi')$ можно представить в виде:

$$w(\psi') = A_+ e^{-\frac{1}{2} \gamma^{3/2} \varepsilon^{1/2} (\psi' - \psi_0)^2} \quad (3.5)$$

Связь между ψ , ψ' и ℓ при малых ψ можно приближённо записать в виде:

$$\psi' = \psi + k(\bar{e} - \ell) \quad (3.6)$$

Интегрирование приводит к следующей зависимости $W(\psi)$:

$$w(\psi) = A_+ \sqrt{\pi} \gamma^{1/4} \varepsilon^{3/4} e^{-\tilde{\gamma}\psi} \exp\left\{ \tilde{\gamma}\psi_0 - \tilde{\gamma}^2 \alpha (16 \varepsilon^{1/2} \gamma^{3/2})^{-1} \right\} \cdot \beta \quad (3.7)$$

где $\tilde{\gamma}$ - показатель в асимптотике закона распределения $P(\ell)$ при больших $\ell \gg \bar{e}$: $P(\ell) \sim e^{-\tilde{\gamma}\ell}$, β - постоянная порядка единицы. Используя формулу (1.17) и условие нормировки, на-

ходим:

$$N(E) = \tilde{\beta} \exp \left\{ -\tilde{\gamma} \pi - \frac{1}{\sqrt{a\tilde{\epsilon}}} \left[\int_{-1}^1 \varphi_0(x) dx + \frac{\tilde{\gamma}}{\sqrt{\tilde{\epsilon}\gamma}} - \frac{\tilde{\gamma}^2 \alpha}{16 \sqrt{\tilde{\epsilon}\gamma^3}} - \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\tilde{\gamma}}{\tilde{\epsilon}}} \right] \right\} \quad (3.8)$$

Очевидно, физический смысл полученного результата тот же, что и в предыдущем параграфе. Мы видим, что структура края зоны определяется асимптотикой $P(\ell)$ для больших $\ell \gg \lambda$. В частности, для распределения Гаусса плотность уровней для зоны выглядит совершенно иначе:

$$N(E) \sim e^{-A/k^2}$$

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. Маташинскому за полезную дискуссию.

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

$$\langle V(x) \rangle = 0, \quad \langle V(x), V(x') \rangle = V_0^2 \delta(x-x') \quad (П.1.1)$$

Покажем, как развитый в работе метод сразу приводит к решению задачи о спектре электрона в поле (П.1.1).

Пусть в уравнении (I.1) коэффициент a зависит от номера i и может принимать два значения: $\pm a$ ($a > 0$) с вероятностью $1/2$ каждое. Тогда вместо (I.10) имеем:

$$w(\psi) = \frac{1}{2} \int d\ell P(\ell) \left\{ w[\psi'(\psi, \ell)] \frac{d\psi'(\psi, \ell)}{d\psi} + w[\psi''(\psi, \ell)] \frac{d\psi''(\psi, \ell)}{d\psi} \right\} \quad (П.1.2)$$

где

$$\text{ctg } \psi' = \text{ctg}(\psi - \ell) - \varepsilon; \quad \text{ctg } \psi'' = \text{ctg } \psi + \varepsilon \quad (П.1.3)$$

Аналогично тому, как выводилось уравнение (I.15), получаем:

$$\frac{1}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] = V(z) - \frac{1}{2} [V(z-\varepsilon) + V(z+\varepsilon)] \quad (П.1.4)$$

Если теперь сделать предельный переход

$$\varepsilon \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow \infty, \quad \gamma \varepsilon^2 = \text{const} = \frac{1}{2} V_0^2 \quad (П.1.5)$$

то распределение величины $V(x)$ переходит в гауссовское распределение (П.1.1) [9]. Разлагая теперь в (П.1.4) $V(z \pm \varepsilon)$ в ряд по ε и совершая переход (П.1.5), получим:

$$\frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] + \frac{1}{2} V_0^2 \frac{d^2 V(z)}{dz^2} = 0 \quad (П.1.6)$$

Уравнение (I.19) для числа состояний $N(E)$ в рассматриваемом случае принимает вид:

$$N(E) = \frac{1}{\pi} + \frac{\gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{arccctg } z \left\{ \frac{1}{2} V(z-\varepsilon) + \frac{1}{2} V(z+\varepsilon) - V(z) \right\} dz \quad (П.1.7)$$

Подстановка (П.1.4) в (П.1.7) приводит к

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

Уравнение (П.1.6) для $V(z)$ легко решается и число состояний $N(E)$ может быть выражено через функции Эйри [10].

ПРИЛОЖЕНИЕ 2.

Пусть задано

$$p(\ell) = \gamma^2 \ell e^{-\gamma \ell}; \quad \int_0^{\infty} p(\ell) d\ell = 1; \quad \bar{\ell} = 2/\gamma \quad (\text{П.2.1})$$

Двукратным дифференцированием уравнения (I.10) по ψ аналогично выводу уравнения (I.15) находим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \left\{ (1+z^2) \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] \right\} &= \\ &= 2\gamma \frac{d}{dz} [(1+z^2)V(z)] + \gamma^2 [V(z-\varepsilon) - V(z)] \end{aligned} \quad (\text{П.2.2})$$

Подстановка (П.2.2) в (I.19) даёт:

$$N(E) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \left\{ z^2 V(z) - \frac{1}{2\gamma} z^2 \frac{d}{dz} (z^2 V(z)) \right\} \quad (\text{П.2.3})$$

Полученный результат показывает, что формула (I.17) не является универсальной.

ЛИТЕРАТУРА

1. F. J. Dyson. Phys. Rev., 92, 1339 (1953)
2. И.М.Лифшиц. УФН, 83, 617 (1964).
3. E. W. Montzoll, 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, n543 (1965)
8. И.В.Андреев, ЖЭТФ, 48, 1437 (1965).
9. M. A. Leibowitz. J. Math. Phys., 4, 852 (1963)
10. В.И. Нахрезин. Phys. Rev., 139, 104A (1965)

Ответственный за выпуск Моисеев С.С.
Тираж 200 экз. Бесплатно

Отпечатано на ротапинтере в ИЯФ СО АН СССР
20.01-1966 г.