УДК 537.311

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАССТОЯНИЙ МЕЖДУ БЛИЖАЙШИМИ УРОВНЯМИ ЭНЕРГИИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ В ОБЛАСТИ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ—ДИЭЛЕКТРИК

И. Х. Жарекешев

На основе численного моделирования рассмотрено распределение расстояний между парами соседних уровней энергии неупорядоченной системы конечного размера. В рамках модели Андерсона показано, что переход между распределениями Вигнера и Пуассона, сопутствующий переходу металл—диэлектрик, связан с квантовомеханическим отталкиванием уровней. Полученные результаты хорошо согласуются с характером зависимости дисперсии числа уровней в заданном интервале энергии от среднего числа уровней в нем при изменении степени неупорядоченности системы.

Известно, что статистические свойства уровней энергии таких сложных систем, как молекулы, атомные ядра, твердые тела мезоскопических размеров, могут быть хорошо описаны спектрами случайных матриц [1]. Распределение уровней энергии, соответствующих собственным значениям этих матриц, сильно коррелировано, что приводит к отталкиванию между уровнями [2]. В частности, для случайных матриц ортогонального ансамбля вероятность иметь два ближайших уровня на расстоянии s описывается формулой Вигнера [3]

$$P_W\left(\frac{s}{\Delta}\right)=\frac{\pi}{2}\frac{s}{\Delta}\exp\left[-\frac{\pi}{4}\left(\frac{s}{\Delta}\right)^2\right], \tag{1}$$

где $\Delta\equiv\langle s\rangle$ — среднее расстояние между уровнями. С другой стороны, если недиагональные элементы матриц равны нулю, то мы имеем абсолютно случайную последовательность собственных значений и тогда расстояния между ближайшими соседними уровнями энергии распределены по Пуассону

$$P_P(s/\Delta)=\exp(-s/\Delta). \tag{2}$$

Если речь идет о спектре энергетических уровней частицы в случайном потенциале, распределения Вигнера и Пуассона реализуются соответственно в системах со «слабым» и «сильным» беспорядком, т. е. в хорошем металле и глубоком диэлектрике [4, 5]. Представляет интерес рассмотреть переход от распределения (1) к распределению (2), сопутствующий переходу металл—диэлектрик (ПМД). Ранее в работе [6] были представлены предварительные результаты вычисления функции распределения $P(s/\Delta)$ расстояний между ближайшими уровнями в модели Андерсона на кубической решетке размерами $5\times5\times5$ с периодическими граничными условиями для различной степени беспорядка и обсуждался переход между распределениями (1) и (2). В настоящей работе функция $P(s/\Delta)$ изучена в более широкой области расстояний между уровнями $0\leqslant s/\Delta\leqslant 4$, что позволило проследить асимптотическое поведение функции распределения $P(s/\Delta)$ при больших значениях s/Δ.

Гамильтониан Андерсона имеет следующий вид:

$$H = I\left[\sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i + \sum_{i,\,j} (a_i^+ a_j + a_j^+ a_i)\right], \tag{3}$$

где a_i^+ (a_i) — операторы рождения (уничтожения) электрона на узле i; j — номера ближайших в решетке соседей узла i; ε_i — случайная энергия узла i, измеренная в единицах интеграла перекрытия I ближайших узлов и равномерно распределенная в интервале от $-V$ до V. Известно, что в такой модели ПМД происходит при степени беспорядка, равной $V = V_c \simeq 8$ [7]. Ясно, что в диэлектрической фазе вдали от ПМД, когда $V \gg V_c$, перекрытием волновых функций узлов решетки можно пренебречь и распределение уровней практически совпадает с распределением затравочных энергий узлов ε_i, т. е. является абсолютно случайным, а распределение расстояний между ними описывается формулой Пуассона (2). Для того чтобы проследить, как меняется функция распределения P (s/Δ)

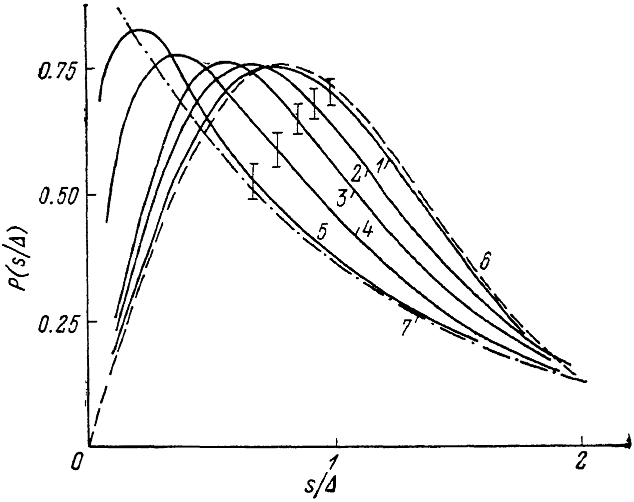

Рис. 1. Функция распределения P (s/Δ) расстояний между ближайшими соседними уровнями с различной степенью беспорядка V.

6 соответствует формуле Вигнера (1), *7* — формуле Пуассона (2).

при уменьшении беспорядка V, с помощью ЭВМ диагонализовался гамильтониан Андерсона (3) с периодическими граничными условиями при различных значениях V, затем вычислялись все расстояния между парами ближайших уровней в центрированной вокруг $E=0$ полосе энергии шириной $(V+6)/2$, в пределах которой плотность состояний почти одинакова. Область энергетических расстояний $0 \leqslant s/\Delta \leqslant 4$ разбивалась на 40 равных отрезков, и производилась сортировка значений s/Δ по этим отрезкам для $\sim$300 реализаций случайных наборов энергий ε_i с заданным разбросом V. Функция распределения P (s/Δ) нормировалась в интервале $[0, \infty]$.

На рис. 1 показаны кривые зависимостей P (s/Δ), полученные при численном моделировании, для $V=3$ (*1*), 7.5 (*2*), 10 (*3*), 15 (*4*), 30 (*5*). Видно, что при $V=3$ функция P (s/Δ) почти не отличается от распределения Вигнера (1). Аналогичный результат для хорошего металла был получен в работе [4] с гауссовой функцией распределения энергий узлов ε_i. При $V=5$ в области $1 \leqslant s/\Delta \leqslant 2$ происходит небольшое уменьшение P (s/Δ) по сравнению с формулой (1), и с увеличением степени беспорядка $V \geqslant 7.5$ этот эффект заметно усиливается. Одновременно происходит увеличение P (s/Δ) в области хвоста функции $s/\Delta > 2$. Начиная с $V=10$ кривая приближается к зависимости P_P (s/Δ) (2), что является свидетельством перехода в диэлектрическую фазу. Наблюдаемый при вычислении функции P (s/Δ) провал в области малых s/Δ связан, по-видимому, с конечностью размеров кубической решетки [6].

Перейдем теперь к асимптотическому поведению функции распределения $P(s/\Delta)$ при больших s/Δ, там, где зависимости $P_W(s/\Delta)$ и $P_P(s/\Delta)$ различаются существенно. Переход между ними при изменении параметра беспорядка V связан с изученным в работах [5, 6] изменением характера зависимости дисперсии числа уровней $\langle\delta N^2(E)\rangle \equiv \langle N^2(E)\rangle - \langle N(E)\rangle^2$ в заданном интервале энергии E от среднего числа уровней $\langle N(E)\rangle$ в этом интервале. Действительно, вероятность того, что в полосе шириной s, в которой в среднем $\langle N(s)\rangle$ уровней, не найдется ни одного уровня, может быть оценена со стороны относительно малых, гауссовых флуктуаций как

$$P\left(\frac{s}{\Delta}\right) \backsim \exp\left[-\frac{\langle N(s)\rangle^2}{\langle\delta N^2(s)\rangle}\right] = \exp\left[-\frac{(s/\Delta)^2}{\langle\delta N^2(s)\rangle}\right]. \tag{4}$$

В случае глубокого диэлектрика $V \gg V_c$, когда для абсолютно случайной последовательности уровней дисперсия $\langle\delta N^2(s)\rangle$ максимальна и равна $\langle N(s)\rangle$, из формулы (4) легко получить распределение Пуассона $P_P(s/\Delta)$ (2). При уменьшении беспорядка V возникает дополнительная «жесткость» системы уровней за счет их квантовомеханического отталкивания, что приводит к уменьшению дисперсии числа уровней $\langle\delta N^2(s)\rangle$ и, следовательно, к увеличению скорости спада функции $P(s/\Delta)$. Если считать, что в точке перехода отношение $\langle\delta N^2(s)\rangle/\langle N(s)\rangle \equiv \varkappa$ равно константе (грубая теоретическая оценка дает $\varkappa_T \simeq 0.25$ [6]), то при достаточно больших s/Δ из (4) имеем

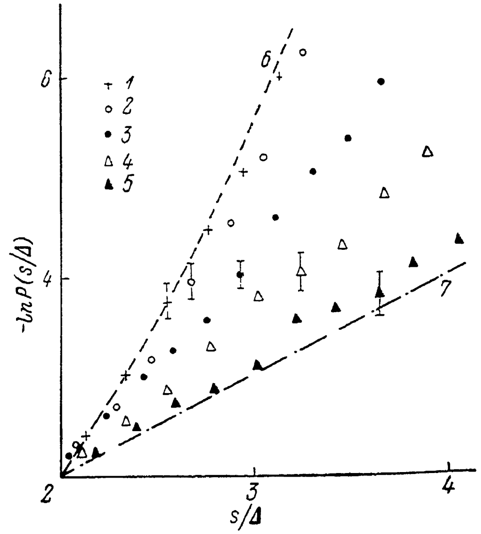

Рис. 2. Зависимость логарифма функции распределения $-\ln P(s/\Delta)$ расстояний между ближайшими соседними уровнями при различных значениях V.
6 соответствует формуле Вигнера (1), *7* — формуле Пуассона (2).

$$P\left(\frac{s}{\Delta}\right) \backsim \exp\left(-\frac{\langle N(s)\rangle}{\varkappa}\right) \equiv \exp\left(-\frac{1}{\varkappa}\frac{s}{\Delta}\right). \tag{5}$$

Спад функции $P(s/\Delta)$ по формуле (5), хотя и более быстрый, чем по (2), все же оказывается более медленным, чем по (1). В критической области ПМД со стороны диэлектрика по мере роста s/Δ происходит переход от промежуточной асимптотики (2) к далекой (5).

На рис. 2 приведены полученные на ЭВМ зависимости $-\ln P(s/\Delta)$ в области энергий $2 \leqslant s/\Delta \leqslant 4$ для параметра беспорядка $V=3$ (*1*), 5 (*2*), 7.5 (*3*), 15 (*4*), 30 (*5*). Видно, что при больших значениях $V=30$ $P(s/\Delta) \simeq \simeq P_P(s/\Delta)$. Считая, что в критической области зависимости $-\ln P(s/\Delta)$ для $V=7.5$, 10 являются линейными, можно по формуле (5) получить величины коэффициента пропорциональности $\varkappa(7.5)=0.38$, $\varkappa(10)=0.5$, которые оказались больше его теоретического значения $\varkappa_T$. Такое расхождение можно объяснить тем, что рассматриваемые энергии s/Δ недостаточно велики, так что «экспериментальная» зависимость $P(s/\Delta)$ еще не выходит на асимптотику (5). Действительно, из рис. 3 работы [6] можно увидеть, что при $V=7.5$ и 10 значения $\langle\delta N^2(s)\rangle/\langle N(s)\rangle$ на отрезке $2 \leqslant \leqslant s/\Delta \leqslant 4$ еще не становятся константой. Они зависят от энергии s, причем их величины на этом интервале очень близки к $\varkappa(7.5)$ и $\varkappa(10)$ соответственно. При удалении от критической области в сторону металлической фазы $V=5$ зависимость $P(s/\Delta)$ приближается к распределению

Вигнера (1), а при $V=3$ практически с ним совпадает. Таким образом, численно полученные экспоненциальные зависимости функции распределения $P(s/\Delta)$ по обе стороны от ПМД хорошо согласуются с величиной дисперсии $\langle\delta N^2(s)\rangle$, если пользоваться соотношением (4).

Автор выражает глубокую благодарность Б. И. Шкловскому и Б. Л. Альтшулеру за всестороннюю помощь при написании работы.

Литература

[1] Statistical Theories of Spectra: Fluctuations / Ed. by C. E. Porter. N. Y. Acad. Press, 1965. 576 p.

[2] Dyson F. J. // J. Math. Phys. 1962. V. 3. N 1. P. 140—156, 157—165, 166—175 (пер.: Дайсон Ф. Статистическая теория энергетических уровней сложных систем. М., 1963. 121 с.).

[3] Wigner E. P. // Ann. Math. 1951. V. 53. N 1. P. 36—57; 1955. V. 62. N 3. P. 548—564; 1957. V. 65. N 2. P. 203—207; 1958. V. 67. N 2. P. 325—331.

[4] Sivan U., Imry Y. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 12. P. 6074—6083.

[5] Альтшулер Б. Л., Шкловский Б. И. // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. N 1. С. 220—234.

[6] Альтшулер Б. Л., Жарекешев И. Х., Коточигова С. А., Шкловский Б. И. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. N 3. С. 343—355.

[7] Mackinon A., Kramer B. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 21. P. 1546—1549.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
20 июля 1988 г.