

УДК 538.9, 539.21:537.1

И. Х. ЖАРЕКЕШЕВ

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МЕЖУРОВНЕВЫХ РАССТОЯНИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

Рассматриваются статистические свойства дискретных уровней энергии электронных состояний в неупорядоченных квантовых системах. Показывается, что распределение межуровневых расстояний подвергается критическому переходу от вигнеровской статистики к пуассоновской при увеличении степени беспорядка.

Введение. Статистико-вероятностные свойства спектров энергии неупорядоченных квантовых систем привлекают все большее внимание. Известно, что при увеличении амплитуды флюктуаций случайного потенциала однозелектронные волновые состояния преобразуются из распространенных в локализованные. Это явление называется локализацией электронных состояний и является важной основой для перехода металл-диэлектрик (или перехода металл-изолят). Переход металл-диэлектрик является фазовым переходом и обладает определенными критическими свойствами, присущими для обычных фазовых переходов в термодинамике, и описывается такими величинами как, например, радиусом корреляции, параметром порядка, критическими индексами и др.

Влияние беспорядка на поведение волновых функций проявляется в том, что взаимное расположение дискретных уровней энергии на шкале энергии по отношению друг к другу меняется. Происходит перераспределение их положений. В этом случае говорят о статистике уровней энергии, подразумевая под этим распределении расстояний между ближайшими уровнями энергии электронов. В более строгом математическом определении речь идет о функции распределения плотности вероятности $P(s)$ того, что два произвольно выбранных из спектра уровня находятся на расстоянии s друг от друга. Если какой-либо уровень обладает энергией E , и на расстоянии s от него находится интервал шириной ds , то $P(s)ds$ является вероятностью того, что соседний уровень энергии обязательно лежит в этом интервале. Таким образом, функция распределения межуровневых расстояний служит важной характеристикой для описания спектральных флюктуаций неупорядоченных систем. В настоящей работе показано, что распределение межуровневых расстояний $P(s)$ подвергается критичес-

кому переходу от вигнеровской статистики к пуассоновской, который сопровождает переход металл-диэлектрик. Наши расчеты также выявили существенные отклонения статистики уровней от общепринятой теории хаотических матриц, особенно в асимптотической области.

Теория хаотических матриц. В пятидесятых годах Вигнер [1] нашел, что функция распределения межуровневых расстояний в гауссовом ортогональном ансамбле хаотических матриц хорошо аппроксимируется следующим выражением

$$P_w^o(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right), \quad (1)$$

в то время как в гауссовом унитарном ансамбле она имеет вид

$$P_w^u(s) = \frac{32}{\pi} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right). \quad (2)$$

Межуровневые расстояния s измеряются в единицах среднего его значения Δ между ближайшими уровнями энергии

$$s = s_i = \frac{(\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i)}{\Delta}. \quad (3)$$

Вигнеровские предположения (Wigner surmise), описанные формулами (1), (2), на самом деле не точные. Они слегка отклоняются от точных функций распределения $P_{\text{GOE}}(s)$ и $P_{\text{GUE}}(s)$ в теории хаотических матриц, которые могут быть вычислены только численно и приводятся в литературе в табличном виде, и в полном виде не приводятся в аналитической форме. Это отклонение составляет только 5% в относительной точности в интервале $0 < s < 2$, где все функции $P(s)$ составляют 99%. В действительности, явные функциональные выражения точных функций для распределения межуровневых расстояний $P_{\text{RMT}}^{o,u,r}(s)$ до сих пор не известны временной науке, в отличие

от двухуровневых корреляционных функций $R_{\text{RMT}}^{o,u,t}(s)$. В литературе [2] можно найти весьма удачные результаты дальнейших аппроксимаций, например, более высоких порядков по s .

Для малых расстояний s поведение распределения описывается степенным законом:

$$P_{\text{RMT}}(s) = B_{\text{RMT}} s^\beta + O(s^{\beta+1})^2, \quad s \ll 1, \quad (4)$$

где β является «параметром отталкивания», ответственным за класс универсальности хаотических ансамблей. $\beta = 1, 2$ и 4 для гауссово-ортогонального (GOE), гауссово-унитарного (GUE) и гауссово-симплектического (GSE) ансамблей, соответственно. Более точные численные коэффициенты перед степенным законом даются следующими выражениями:

$$B_{\text{GUE}}^o = \frac{\pi^2}{6}, \quad B_{\text{GUE}}^4 = \frac{\pi^2}{3}, \quad B_{\text{GSE}}^4 = \frac{2^4 \pi^4}{135}, \quad (5)$$

для трех вышеуказанных ансамблей.

В другом предельном случае, а именно при асимптотически больших энергиях s мы имеем

$$P(s) = \exp \left[-\frac{\beta \pi^2}{16} s^2 - \frac{(2-\beta)\pi}{4} s + O(\ln s) \right]. \quad (6)$$

Металлический режим. Численные расчеты для $P(s)$, проведенные в настоящей работе, в металлическом режиме, когда степень беспорядка потенциала достаточно мала, показали, что для ортогональной симметрии ансамбля распределение существенно отличается от вигнеровского предположения (1), особенно в его асимптотическом хвосте. Для области $0 < s < 2$ численная функция $P(s)$ очень близко расположено к точному результату хаотических матриц [2]. Причем относительное отклонение от $P_{\text{GOE}}(s)$ намного меньше, чем отклонение от вигнеровской формулы (1). Чтобы достичь такой точности необходимо сгенерировать огромное количество данных по диагонализации матриц, причем такое, чтобы среднестатистическая ошибка составляла меньше чем 0,3–0,5%.

Два разных типа граничных условий применялись к матричному гамильтониану: (а) периодические и (б) типа Дирихле. Рисунок 1 показывает хорошее совпадение численных результатов для беспорядка $W=5$ (металлический режим) с точным результатом $P(s)$ для GOE. Это приближение приемлемо до тех пор, пока энергия s не

превышает параметр Таулесса $s < E_f$ [3, 4]. Чтобы облегчить количественное сравнение с правильным результатом GOE, мы провели прямую диагонализацию 10^5 вещественных симметрических хаотических матриц размером 100×100 для двух типов граничных условий. После тщательной процедуры выравнивания спектра (spectrum infolding) функция распределения $P(s)$ была получена с высокой точностью и хорошо согласовывалась с формулами (4) и (6). Это показано на рис. 1 сплошной линией.

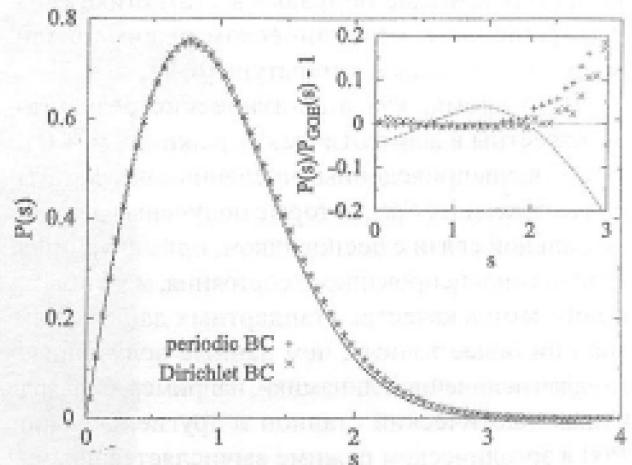


Рис. 1. Функция распределения $P(s)$ междууровневых расстояний для неупорядоченной системы.

Система размера $L=8$ и беспорядка $W=5$.

Сплошная линия точный результат GOE.

На вставке: относительное отклонение $P(s)$ от результата GOE. Число междууровневых расстояний составляет 10^5 . На вставке показано относительное отклонение для двух типов граничных условий: периодические (+) и типа Дирихле (x).

Заметное отклонение $P(s)$ от $P_{\text{GOE}}(s)$ начинается уже при энергиях $s \geq 2$ или $s \geq 2,6$ в зависимости от типа граничных условий. Аналогичные отклонения найдены нами и для унитарного случая, соответствующего приложенного постоянного магнитного поля. Эти значения энергии показывают границу раздела для двух режимов эргодического и диффузного, которая непосредственно связана с Таулессовским параметром. По сравнению с исследованием дисперсии числа уровней [5] вычисление слабо-локализационных поправок для распределения $P(s)$ представляется более затруднительным из-за экспоненциально-го спадания плотности вероятности для больших энергий s . На практике, первая величина лучше предназначена для изучения широкомасштабных

корреляций (т.е. для больших энергий $s \geq \Delta$), в то время как вычисление распределения $P(s)$ наиболее подходит для изучения поведения корреляций в электронном спектре на малых масштабах энергий ($s \leq \Delta$).

Следует отметить, что распределение $P(s)$ содержит полную информацию о всех n порядках спектральных корреляций в отличие от дисперсии $\langle \delta N^2 \rangle$, для полного описания которой достаточны корреляции до второго порядка ($n < 2$), т.е. двухуровневые корреляционные функции. Непертурбативные поправки к статистике Вигнера-Дайсона в металлическом режиме были подробно изучены в литературе [6, 7].

В то время, как аналитические результаты известны в асимптотических режимах $s \rightarrow 0$ и $s \rightarrow \infty$, вышеупомянутые численные результаты для вычисления $P(s)$, которые получены из модели сильной связи с беспорядком, применяемой в теории конденсированного состояния, могут быть принятыми в качестве стандартных данных, так как они более точные, чем данные полученные из задач нелинейной динамики, например, билльярд Синая, хаотический стадион и другие. Обычно $P(s)$ в эргодическом режиме вычисляется непосредственно из ансамбля хаотических матриц, все элементы которых распределены случайно с одинаковой дисперсией. Оказалось, что эмпирическая функция распределения плотности вероятности $P(s)$, полученная численно из модели сильной связи может быть более точной, чем табличные данные этой функции приведенные в литературе (см., например, [2] и ссылки в ней).

Для ансамбля GUE вычисление $P(s)$ может быть проведено также из нулей римановской функции. В принципе, можно сгенерировать очень точные данные благодаря гигантской мощности современных суперкомпьютеров (до 10 тераплоп/сек). Так как спектральная статистика обладает общей универсальностью, знание $P(s)$ обеспечивает статистическую теорию важной информации, и также полезна в области метрологии и стандартизации.

Переход металл-диэлектрик. Ранее было показано, что статистика уровней энергии электронных состояний в металлическом режиме описывается теорией, разработанной Вигнером и Дайсоном [8], в то время как $P(s)$ в диэлектрическом режиме хорошо аппроксимируется формулой Пуассона $P_p(s) = e^{-s}$. Причина последнего

заключается в том, что волновые функции электрона при малом беспорядке (т.е. при степени беспорядка W хаотического потенциала много меньшего, чем некоторое критическое значение W_c) между соседними примесными центрами перекрываются. В то же время для большого беспорядка ($W \gg W_c$) волновые функции экспоненциально спадают с удалением от центра локализации. При этом взаимное перекрытие волновых функций стремится к нулю.

«Глубоко» в режиме диэлектрика, собственные значения гамильтониана задачи являются практически не коррелированными переменными. Проблема перехода $P(s)$ от $P_{\text{GOE}}(s)$ до $P_p(s)$, который сопровождает переход металл-изолятор, вызванный изменением степени беспорядка, в настоящее время привлекает большое внимание. В этой связи особенно интересной задачей является доказательство существования «третьей» фундаментальной функции распределения, которая является масштабно-инвариантной функцией $P_c(s)$ точно в критической точке локализационного перехода [9]. Эта новая функция получила название *критической* функции распределения, а соответствующая ей статистика *критической* статистики [10-12].

В этом разделе исследуется функция распределения расстояний между ближайшими уровнями энергии, которой традиционно уделяется основное внимание при обсуждении вопроса об отталкивании уровней. Для случайных матриц, элементы которых распределены вокруг нуля с одинаковой дисперсией, вероятность иметь два ближайших собственных значения на расстоянии s описывается формулой Вигнера:

$$P(s/\Delta) = (\pi/2) \cdot (s/\Delta) \exp[-\pi/4(s/\Delta)^2], \quad (7)$$

Здесь все энергии измеряются в абсолютных величинах $s = s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$ в отличие от (3). Отметим, что по определению $\Delta \equiv \langle s \rangle$. С другой стороны, если недиагональные матричные элементы равны нулю, а диагональные случайно распределены от $-V/2$ до $V/2$, то реализуется распределение Пуассона:

$$P(s/\Delta) = \exp[-s/\Delta]. \quad (8)$$

Если речь идет о спектре частицы в случайном потенциале, распределения (7) и (8) справедливы для систем со слабым и сильным беспорядком, соответственно. Численное моделирование проводилось с целью проследить, как в модели

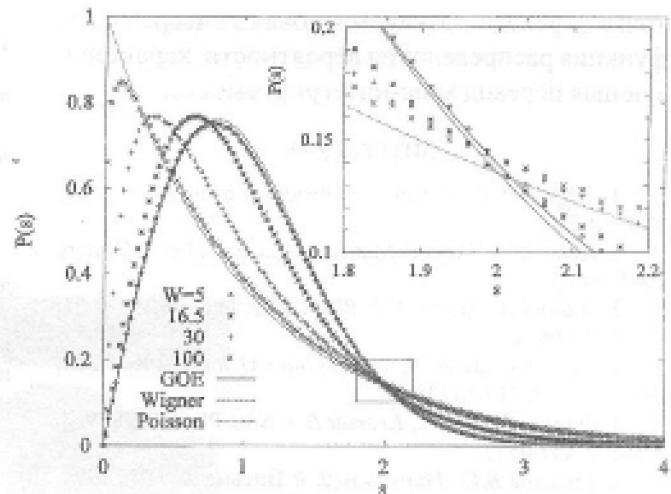
и вспомогательные материалы, а также обработка и анализ экспериментальных данных. Важно отметить, что в работе были использованы различные методы и приборы для изучения физических явлений.

Рис. 2. Функция распределения $P(s)$ межуровневых расстояний для неупорядоченной системы.

Система размера $L=6$ и различной степени беспорядка $W=V/I = 5, 16.5, 30$ и 100 .

Сплошная линия точный результат GOE, штриховая – вигнеровское распределение (7), пунктирная – пуассоновское распределение (8).

На вставке: увеличенная область вблизи минимума общего пересечения



Андерсона происходит переход между распределениями Вигнера и Пуассона при увеличении беспорядка, сопутствующий переходу металл-диэлектрик. Результаты вычислений показаны на рис. 2. Видно, что функция распределения расстояний между ближайшими уровнями $P(s/\Delta)$ в металлической фазе $V/I=5$ совпадают с (7). При $V/I < 5$ в области $1.2 < (s/\Delta) < 2$ возникает небольшое понижение $P(s/\Delta)$ по сравнению с (7). Одновременно $P(s)$ увеличивается в области хвоста функции. Важно, однако, подчеркнуть, что до $V/I=16.5$ не происходит существенных изменений в области малых s . При дальнейшем увеличении V/I в диэлектрической фазе $P(s/\Delta)$ приближается к распределению Пуассона (8).

В области асимптотически больших энергий s/Δ переход от (7) к (8) связан с изменением характера зависимости $\langle \delta N^2 \rangle$ от $\langle N \rangle$ при увеличении V . Действительно, вероятность того, что в полосе s , в которой в среднем $\langle N(s) \rangle$ уровней, не найдется ни одного уровня, оценивается со стороны относительно малых гауссовых флуктуаций как

$$\begin{aligned} P(s/\Delta) &\propto \exp\left(-\frac{\langle N(s) \rangle^2}{\langle \delta N^2(s) \rangle}\right) = \\ &= \exp\left[-\left(\frac{s}{\Delta}\right)^2 \frac{I}{\langle \delta N^2 \rangle}\right]. \end{aligned} \quad (9)$$

В случае диэлектрика, когда $V \gg V_c$, из (9) легко получить соотношение близкое к (8). При уменьшении беспорядка V возникает дополнительная жесткость системы уровней за счет их

отталкивания уровнями за счет их отталкивания, это приводит к уменьшению $\langle \delta N^2 \rangle$ и, следовательно, к увеличению скорости спада $P(s/\Delta)$. На переходе металл-диэлектрик получаем

$$P(s/\Delta) \propto \exp(-\langle N(s) \rangle/\alpha) = \exp(-(s/\Delta)(I/\alpha)). \quad (10)$$

Спад по формуле (10), хотя и более быстрый, чем по (8), все же оказывается более медленным, чем по (7). В критической области для $V/I=16.5$ численно найденная функция распределения $P(s/\Delta)$ описывается асимптотикой (10) с коэффициентом $\alpha = 0.34$ близким к его качественной оценке, найденной в работе [13]. Таким образом, функция распределения $P(s/\Delta)$ по обе стороны от перехода хорошо согласуется с величиной дисперсии $\langle \delta N^2 \rangle$, если пользоваться соотношением (9).

Заключение. В работе была рассмотрена статистика дискретных уровней энергии электронов в неупорядоченных системах вблизи критической точки перехода металл-диэлектрик. Используя модель сильной связи с беспорядком, установлено, что статистические свойства энергетического спектра для гауссовых ансамблей заметно отличаются от ранее полученных аналитических результатов. Были получены асимптотические выражения для функции распределения расстояний между соседними уровнями $P(s)$ для ортогонального ансамбля. Показано, что статистика соседних уровней энергии испытывает скэйлинговый переход между двумя глобальными законами вероятности распределений: между функцией Вигнера-Дайсона, соответствующей хаосу, и пуассоновским распределением, соответствующему интегрируемости. В критической

точке перехода появляется новая универсальная функция распределения вероятности, характеризующая переход хаос-интегрируемость.

ЛИТЕРАТУРА

1. Wigner E.P. // Proc. Cambridge Philos. Soc. 1951. V. 47. P. 790.
2. Mehta M.L. Random Matrices, Academic Press. Boston, 1991. 543 p.
3. Altland A., Gefen Y. // Phys. Rev. Lett. 1993. V. 51. P. 10671-10674.
4. Altland A., Gefen Y., Montambaux G. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 76. P. 1130-1133.
5. Zharekeshev I. Kh., Kramer B. // Ann. Phys. 1998. V. 7. N 5-6. P. 442-451.
6. Красцов В.Е., Мирлин А.Д. // Письма ЖЭТФ. 1994. Т. 60. С. 645-648.
7. Mirlin A.D. // Phys. Rep. 1998. V. 295. P. 1-256.
8. Ефетов К.Б. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. С. 833-851.
9. Аронов А.Г., Красцов В. Е., Лернер И.В. // Письма ЖЭТФ. 1994. Т. 59. С. 39-45.
10. Альтишупер Б.Л., Жарекесев И.Х., Комочигова С.А., Шкловский Б.Л. // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. С. 343-352.

11. Zharekeshev I.Kh., Kramer B. // Comp. Phys. Comm. 1999. **121-122**. P. 502-506.
12. Zharekeshev I.Kh., Kramer B. // Phys. Rev. Lett. 1997. **79**. P. 717-721.
13. Batsch M., Zharekeshev I.Kh., Schweitzer L., Kramer B. // Phys. Rev. Lett. 1996. **77**. P. 1552-1555.

Резюме

Реттелмеген квантовалық жүйелердің энергияның дискреттік деңгейіндегі электрондық жағдайының статистикалық қасиеттері қарастырылған. Деңгейаралық қашықтықтардың белінүінің вагнерлік статистикадан пуассондық статистикага ауысының реттелмей деңгейінің есken кезінде тым жиленетіндігі көрсетілген.

Summary

The statistical properties of discrete energy levels of electronic states in disordered quantum systems are discussed. It is shown that the level spacing distribution undergoes the critical transition from Wigner statistics to Poisson statistics at the increase of disorder degree.

Key words: disordered systems, electronic transport, metal-insulator transition

КазНУ им. аль-Фараби,
г. Алматы

Поступила 25.02.10г.