

УДК 530.145

Г. М. ЗАСЛАВСКИЙ, член-корреспондент АН СССР Р. З. САГДЕЕВ

## ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ ЭЛЕКТРОНА В «ИСПОРЧЕННОЙ» ОДНОМЕРНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ

За последнее время был разработан ряд методов отыскания плотности распределения энергетических уровней в неупорядоченных системах (1-7). Одним из наиболее актуальных приложений этих методов является задача об определении энергетического спектра электрона в неупорядоченных системах типа «испорченной» решетки или аморфных тел. Различные аспекты этой проблемы рассмотрены в обзоре И. М. Лифшица (2).

Главную трудность представляет определение спектральной плотности  $\rho(E)$  вблизи краев разрешенных энергетических зон  $E_0$ , так как в этом случае даже исчезающе малая степень неупорядоченности приводит к сильному изменению характера спектра. Иначе говоря, спектральная плотность вблизи края зоны ведет себя неаналитическим образом как функция  $(E - E_0)$ . Это приводит, в частности, к неприменимости прямых методов использующих разложение по степени неупорядоченности (2).

Для обхода этой трудности в одномерном случае были найдены модели допускающие отыскание асимптотических решений для спектральной плотности  $\rho(E)$ . В этих решаемых моделях потенциал  $V(x)$  в уравнении Шредингера для электрона задается либо в виде  $V(x) = a \sum_k \delta(x - x_k)$

где точки  $x_k$  (точки расположения  $\delta$ -образных примесей) распределены по случайному закону типа пуассоновского (5), либо в виде белого шума с гауссовскими корреляциями. Все эти модели описывают полностью неупорядоченные системы.

Ниже будет рассмотрена одномерная модель типа «испорченной решетки», когда потенциал  $V(x)$  содержит регулярную периодическую добавку  $V_0(x)$  с периодом  $L_0$ . Итак, исходное уравнение Шредингера в нашей модели имеет вид:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \left[ E - V_0(x) - a \sum_k \delta(x - x_k) \right] \Psi = 0;$$

$$a > 0; \quad V_0(x + L_0) = V_0(x),$$

где координаты примесных  $\delta$ -функций (точки  $x_k$ ) распределены по пуассоновскому закону, т. е. вероятность попадания примеси в интервал  $(x, x + dx)$  равна  $\gamma dx$ .

Примесные  $\delta$ -функции будем располагать в узлах периодической решетки. Между двумя последовательными примесями, расположенными в точках  $x_n, x_{n+1}$ , решение уравнения (1) имеет вид блоховских волновых функций, которые мы будем считать известными:

$$\Psi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{iq(x-x_{n+1})} u_{n+1}(x - x_{n+1}) - A_{n+1}^* e^{-iq(x-x_{n+1})} u_{n+1}^*(x - x_{n+1}),$$

где  $q$  — квазиимпульс;  $u(x)$  — известная функция, периодическая с периодом  $L_0$ . Используя условие непрерывности  $\Psi(x)$  и уравнение (1), найдем

шем связь между фазами волновой функции  $\Psi_n(x)$  и  $\Psi_{n+1}(x)$

$$\operatorname{ctg}(\psi_{n+1} + \Delta_{n+1} - ql_n) = \operatorname{ctg}(\psi_n + \Delta_n) + \frac{a}{\operatorname{Re}\{q - iu'(0)/u(0)\}}, \quad (2)$$

где  $\Delta_n = 2\pi m_n$ ,  $m_n$  — произвольное целое число, причем  $m_{n+1} \geq m_n$ ;  $\psi_n$  — фаза  $A_n$ ;  $l_n = x_{n+1} - x_n$  — расстояние между примесными  $\delta$ -функциями, плотность вероятности которого равна

$$P(l) = \gamma e^{-\gamma l}; \quad \gamma = 1/\langle l \rangle. \quad (3)$$

Перепишем для удобства (2) в виде

$$\operatorname{ctg}(\varphi_{n+1} - ql_n) = \operatorname{ctg} \varphi_n + \varepsilon, \quad (4)$$

где обозначено

$$\varphi_i = \psi_i + \Delta_i; \quad \varepsilon = a / \operatorname{Re}\{q - iu'(0) / u(0)\}; \quad (5)$$

$\varphi_i$  есть фаза волновой функции  $\Psi(x)$  в точке  $x_i$ .

Уравнение (4) по своей структуре ничем не отличается от случая  $V_0 \equiv 0$ , что позволяет воспользоваться теперь методом, развитым в (8). В частности, для пуассоновского распределения примесей (3) мы приходим к формуле, полученной в (5) для числа состояний  $N(E)$  с энергией  $< E$ :

$$N(E) = q \lim_{z \rightarrow -\infty} z^2 v(z); \quad z = \operatorname{ctg} \varphi, \quad (6)$$

где  $v(z)$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{q}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1 + z^2) v(z)] = v(z) - v(z - \varepsilon), \quad (7)$$

и условию нормировки  $\int_{-\infty}^{\infty} v(z) dz = 1$ . Следует заметить, что при выводе уравнения (7) в работе (8) использовалось уравнение Шмидта (4)

$$w(\varphi_{n+1}) = \int w(\varphi_n) \frac{d\varphi_n}{d\varphi_{n+1}} P(l_n) dl_n, \quad (8)$$

где  $w(\varphi)$  — нормированная функция распределения фазы  $\varphi$ , а связь между  $\varphi_n$ ,  $\varphi_{n+1}$  и  $l_n$  определяется соотношением (4). В нашем случае  $l_n$  принимает дискретный ряд значений, кратных периоду решетки  $L_0$ , и переход в (8) к интегрированию вместо суммирования можно сделать, если примеси редкие:  $\langle l \rangle \gg L_0$ .

Таким образом, рассматриваемая задача сведена к случаю отсутствия периодической части в потенциале с помощью определенной перенормировки: заменой в (7)  $k$  на  $q$  и измененным согласно (5) выражением для  $\varepsilon$ . Очевидно, что эти изменения не сводятся, вообще говоря, просто к тривиальному введению в (1) эффективной массы электрона.

В случае, когда  $V_0 \equiv 0$ , имеем

$$q = k, \quad \varepsilon = a/k \quad (k^2 = E), \quad (9)$$

и уравнение (7) совпадает с тем, которое решалось в (8) в отсутствие периодического поля. В этом пределе границе спектра соответствует  $k = 0$  и плотность состояний при  $k \rightarrow 0$ , найденная в (8), имеет вид:

$$\rho(E) \sim E^{-3/2} \exp\{-\pi\gamma / \sqrt{E} + \alpha\sqrt{\gamma}/a\} \quad (\alpha \sim 1). \quad (10)$$

При  $V_0 \neq 0$  мы можем воспользоваться известным решением уравнения (7), используя вид  $q$  и  $\varepsilon$  для конкретного периодического потенциала. Рассмотрим в качестве примера модель Кронига — Пенни:

$$V_0(x) = a_0 \sum_n \delta(x - nL_0); \quad a > 0; \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

В этом случае

$$u(x) = e^{i(k-q)x} + B e^{-i(k+q)x}, \quad B = (1 - e^{i(k-q)L_0}) / (\epsilon^{-i(k+q)L_0} - 1), \quad (11)$$

$$\varepsilon = \frac{a}{k} \frac{\sin kL_0}{\sin qL_0}; \quad \cos qL_0 = \cos kL_0 + \frac{a_0}{2k} \sin kL_0.$$

Вблизи левого края  $E_0$  для первой разрешенной зоны из (11) следует

$$q \approx \sqrt{E - E_0}; \quad \varepsilon \approx a / \sqrt{E - E_0}. \quad (12)$$

Делая соответствующие замены в (10) согласно (9), находим

$$\rho(E) \sim (E - E_0)^{-3/2} \exp \{ -\pi\gamma / \sqrt{E - E_0} + \alpha \sqrt{\gamma/a} \}. \quad (13)$$

Вблизи правого края зоны  $E_1$   $q \rightarrow \pi / L_0$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Для энергий  $E$ , достаточно близких к  $E_1$ , всегда выполняется неравенство  $\gamma\varepsilon / q \ll 1$ . Это позволяет разложить  $v(z - \varepsilon)$  в уравнении (7) в ряд по  $\varepsilon$  и ограничиться только двумя первыми членами разложения:

$$\frac{q}{\gamma} \frac{d}{dz} (1 + z^2) v(z) = \varepsilon \frac{dv(z)}{dz}. \quad (14)$$

Уравнение (14) сразу интегрируется и, в соответствии с (6), дает

$$\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} \approx \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{a_0 L_0}{2}} (E_1 - E)^{-1/2}, \quad (15)$$

т. е. сохраняется обычная корневая особенность, как при отсутствии примесей. На рис. 1 приведены кривые  $\rho(E)$  в случае отсутствия примесей (пунктиром) и при наличии примесей (сплошной линией). Полученный

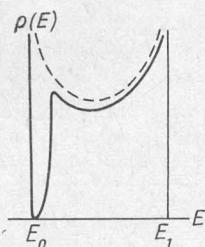


Рис. 1

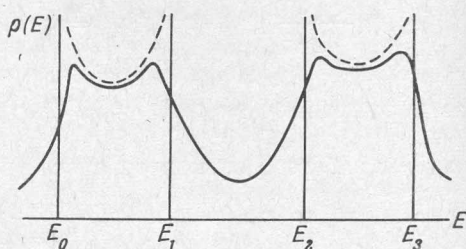


Рис. 2

результат легко понять, так как выбранный нами характер случайных примесей смещает левую границу разрешенной энергетической зоны и тем самым размывает границу, в то время как положение правой границы от примесей не зависит. Запрещенные области в рассматриваемом случае не изменяются. Вблизи края  $n$ -й зоны в формулах (13), (15) следует заменить  $E_{0,1}$  на  $E_n$ .

Аналогичное решение можно провести для любого периодического потенциала  $V_0(x)$ , используя его конкретный вид для определения  $q$  вместо формул (11).

Прием перенормировки основных параметров  $q$  и  $\varepsilon$  с целью сохранения связи между фазами волновых функций типа (4) может быть использован и для другого предельного случая — очень больших концентраций примесей  $\langle l \rangle \ll L_0$ . Пусть, например, потенциал примесей  $V(x)$  представляет собой гауссовский «белый шум»:

$$\langle V(x) \rangle = 0; \quad \langle V(x)V(x') \rangle = \sigma^2 \delta(x - x'). \quad (16)$$

Случайное поле (16) может быть представлено в виде (9)

$$V(x) = \sum_k a_k \delta(x - x_k), \quad (17)$$

где  $a_k = \pm a$  ( $a > 0$ ) с вероятностью  $1/2$  каждое, а точки  $x_k$  по-прежнему распределены по пуассоновскому закону с показателем  $\gamma$ , причем распределение (16) получается в пределе:

$$a \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow \infty, \quad \gamma a^2 = \text{const} = 1/2 \sigma^2. \quad (18)$$

В работе (8) было показано, что формула (6) сохраняется и в случае (17), а уравнение для  $v(z)$  имеет при  $V_0 \equiv 0$  вид

$$\frac{k}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1+z^2)v(z)] = v(z) - {}^{1/2}v(z-\varepsilon) - {}^{1/2}v(z+\varepsilon) \quad \left(\varepsilon = \frac{a}{k}\right), \quad (19)$$

откуда с помощью предельного перехода (18) и (6) следует результат работы (7):

$$N(E) = \pi^{-2} \left\{ \left[ \text{Ai} \left( -\frac{k^2}{(\sigma^2/2)^{3/2}} \right) \right]^2 + \left[ \text{Bi} \left( -\frac{k^2}{(\sigma^2/2)^{3/2}} \right) \right]^2 \right\}^{-1}, \quad (20)$$

где  $\text{Ai}$ ,  $\text{Bi}$  — функции Эйри. Формула (6) следует (8) из

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \langle \Delta \varphi_k \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \langle \varphi_k - \varphi_{k-1} \rangle, \quad (21)$$

где  $M$  — число  $\delta$ -функций на длине решетки, а усреднение проводится по всем конфигурациям. Воспользуемся тем, что среднее расстояние между примесями, согласно (18), стремится к нулю. Тогда нетрудно получить:

$$N(E) = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} dx N(E, x) = \frac{1}{\pi L_0} \int_0^{L_0} dx \langle \Delta \varphi_k(x) \rangle, \quad (22)$$

где  $N(E, x)$  вычисляется с помощью уравнений (19), (6), в которых параметр  $\varepsilon = \varepsilon(x)$ . Для модели Кронига — Пенни, согласно (11), имеем

$$N(E, x) = \pi^{-2} \{ [\text{Ai}(-\xi)]^2 + [\text{Bi}(-\xi)]^2 \}^{-1}, \quad (23)$$

$$\xi = \left[ \frac{2}{\sigma^2} q k^2 \frac{\sin^2 k L_0 \cdot \sin^2 q L_0}{f^2(x)} \right]^{2/3},$$

$$f(x) = \sin^2 kx \cdot \sin^2 q L_0 + [\sin k(L_0 - x) + \sin kx \cdot \cos q L_0]^2.$$

В частности, при  $V_0 \equiv 0$  имеем  $\xi = k^2(2/\sigma^2)^{2/3}$ , и из (22) сразу следует (20). Опуская громоздкое исследование формулы (23), решающей задачу принципиально, приходим к  $\rho(E)$ , имеющей качественно вид, изображенный на рис. 2 (обозначения те же, что и на рис. 1).

В заключение отметим, что если в случае пуассоновского распределения примесей (3) последние располагать не в узлах решетки, то правый край разрешенной зоны смещается вправо и особенность вблизи правого края зоны замазывается. Этот факт легко устанавливается с помощью использования соответствующего значения  $\varepsilon(x)$ .

Поступило  
3 V 1966

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> F. J. Dyson, Phys. Rev., **92**, 1339 (1953). <sup>2</sup> И. М. Лифшиц, УФН, **83**, 617 (1964). <sup>3</sup> E. W. Montroll, R. B. Potts, Phys. Rev., **102**, 72 (1956).  
<sup>4</sup> H. Schmidt, Phys. Rev., **105**, 425 (1957). <sup>5</sup> H. L. Frish, P. L. Lloyd, Phys. Rev., **120**, 1175 (1960). <sup>6</sup> S. F. Edwards, Proc. Phys. Soc., **85**, p. 1, № 543 (1965).  
<sup>7</sup> V. I. Halperin, Phys. Rev., **139**, 104A (1965). <sup>8</sup> Г. М. Заславский, В. Л. Покровский, Препринт Инст. ядерн. физ. Сибирск. отд. АН СССР, 1966; ЖЭТФ, **51**, № 2 (1966). <sup>9</sup> M. A. Leibowitz, J. Math. Phys., **4**, 852 (1963).