

препринт 13

Г.М.Заславский, Р.З.Сагдеев

**Об энергетическом спектре электрона в  
„испорченной“ одномерной периодической  
решетке**

НОВОСИБИРСК 1966

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 краёв 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

$$\rho(E) \sim \exp \left\{ -c / (E - E_0)^\nu \right\} \quad (1)$$

где  $\nu = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$  для одно-, двух и трехмерной систем соответственно. 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

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + [E - V(x)] \Psi = 0; \quad (\hbar = 2m = 1) \quad (2)$$

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  $\langle V(x) \rangle = 0$ ,

$$\langle V(x) V(x') \rangle = \sigma^2 \delta(x-x') \quad [7]. \quad \text{Все эти модели описывают полностью неупорядоченные системы.}$$

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:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + [E - V_0(x) - a \sum_k \delta(x-x_k)] \Psi = 0 \quad (3)$$

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

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. Это упрощение ограничивает наше рассмотрение только случаем редких примесей. Между двумя последовательными примесями, расположенными в точках  $x_n, x_{n+1}$  решение уравнения (3) имеет вид блоховских волновых функций, которые мы будем считать известными

$$\Psi_{n+1}(x) = A_{n+1} e^{iq(x-x_{n+1})} u_{n+1}(x-x_{n+1}) + A_{n+1}^* e^{-iq(x-x_{n+1})} u_{n+1}^*(x-x_{n+1}) \quad (4)$$

где  $q$  - квазиимпульс, а  $u(x)$  - известная функция, периодическая с периодом  $L_0$ . Используя условие непрерывности  $\Psi(x)$  и уравнение (3) напишем связь между фазами волновой функции  $\Psi_n(x)$  и  $\Psi_{n+1}(x)$ :

$$\text{ctg}(\psi_{n+1} + \Delta_{n+1} - q\ell_n) = \text{ctg}(\psi_n + \Delta_n) + \frac{a}{\text{Re}\{q - i \frac{u'(0)}{u(0)}\}} \quad (5)$$

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

$$P(\ell) = \gamma e^{-\gamma \ell}; \quad \gamma = 1/\langle \ell \rangle \quad (6)$$

Перепишем для удобства (5) в виде:

$$\text{ctg}(\psi_{n+1} - q\ell_n) = \text{ctg} \psi_n + \varepsilon \quad (7)$$

где обозначено

$$\psi_n = \psi_n + \Delta_n; \quad \psi_{n+1} = \psi_{n+1} + \Delta_{n+1} \quad (8)$$

$$\varepsilon = a / \text{Re}\{q - i \frac{u'(0)}{u(0)}\}$$

Заметим, что введенные с помощью (8) фазы  $\psi$  имеют следующий смысл:  $\psi_k$  есть фаза волновой функции  $\Psi(x)$  в точке  $x_k$ . Существенным в формуле (7) является независимость  $\varepsilon$  от  $\ell_n$ . Это упрощение связано с тем, что мы располагаем примеси в узлах решетки. В противном случае задача несколько усложняется.

Уравнение (9) 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 (6) мы приходим к формуле, полученной в [5] для числа состояний  $N(E)$  с энергией  $< E$ :

$$N(E) = q \lim_{z \rightarrow -\infty} z^2 \sigma(z); \quad z = \text{ctg} \psi \quad (9)$$

где  $\sigma(z)$  удовлетворяет уравнению

$$\frac{q}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1+z^2)\sigma(z)] = \sigma(z) - \sigma(z-\varepsilon) \quad (10)$$

и условию нормировки:  $\int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(z) dz = 1$ . Следует заметить, что при выводе уравнения (10) в работе [8] использовалось уравнение Шмидта [4]

$$w(\psi_{n+1}) = \int w(\psi_n) \frac{d\psi_n}{d\psi_{n+1}} P(\ell_n) d\ell_n \quad (10')$$

где  $w(\psi)$  - нормированная функция распределения фазы  $\psi$ , а связь между  $\psi_n, \psi_{n+1}$  и  $\ell_n$  определяется соотношением (7). В нашем случае  $\ell_n$  принимает дискретный ряд значений, кратных периоду решетки  $L_0$  и переход к интегрированию в (10'), вместо суммирования можно сделать, если примеси редкие:  $\langle \ell \rangle \gg L_0$ .

Таким образом, рассматриваемая задача сведена к случаю отсутствия периодической части в потенциале с помощью определенной перенормировки: заменой в (10)  $k$  на  $q$  и изменением согласно (8) выражением для  $\varepsilon$ . Очевидно, что эти изменения не сводятся, вообще говоря, просто к тривиальному введению в (2) эффективной массы электрона.

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

$$q = k, \quad \varepsilon = \frac{a}{k}; \quad (k^2 = E) \quad (II)$$

и уравнение (10) 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:

$$\rho(E) = A E^{-3/2} \exp\{-\pi\gamma/\sqrt{E}\} \quad (I2)$$

где  $A$  — известная константа, не зависящая от  $E$ . При  $V_0 \neq 0$  мы можем воспользоваться известным решением уравнения (10), используя вид  $q$  и  $\varepsilon$  для конкретного периодического потенциала. Рассмотрим в качестве примера модель Кренинга-Пенни:

$$V_0(x) = a_0 \sum_n \delta(x - nL_0); \quad a > 0; \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (I3)$$

В этом случае

$$u(x) = e^{i(k-q)x} + B e^{-i(k+q)x} \quad (I4)$$

$$B = \frac{(1 - e^{i(k-q)L_0})}{(e^{-i(k+q)L_0} - 1)}$$

$$\varepsilon = \frac{a_0 \sin kL_0}{k \sin qL_0}$$

$$\cos qL_0 = \cos kL_0 + \frac{a_0}{2k} \sin kL_0$$

Вблизи левого края  $E_0$  для первой разрешенной зоны из (I4) следует

$$q \approx \sqrt{E - E_0}; \quad \varepsilon = a/\sqrt{E - E_0} \quad (I5)$$

Делая соответствующие замены в (I2) согласно (II), находим:

$$\rho(E) = A (E - E_0)^{-3/2} \exp\{-\pi\gamma/\sqrt{E - E_0}\} \quad (I6)$$

Вблизи правого края зоны  $E_1$

$$q \rightarrow \frac{\pi}{L_0}, \quad \varepsilon \rightarrow 0$$

Для энергий  $E$  достаточно близких к  $E_1$  всегда выполняется неравенство:

$$\frac{\gamma\varepsilon}{q} \ll 1$$

Это позволяет разложить  $\sigma(z - \varepsilon)$  в уравнении (10) в ряд по  $\varepsilon$  и ограничиться только двумя первыми членами разложения:

$$\frac{q}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1 + z^2)\sigma(z)] = \varepsilon \frac{d\sigma(z)}{dz} \quad (I7)$$

Уравнение (I7) сразу интегрируется и в соответствии с (9) дает:

$$N(E) = q^{-1} \sqrt{\frac{a_0 L_0}{2}} (E_1 - E) \quad (I8)$$

Из (I8) следует, что вблизи правого края разрешенной энергетической зоны

$$\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE} \approx \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{a_0 L_0}{2}} (E_1 - E)^{-1/2} \quad (I9)$$

т.е. сохраняется обычная корневая особенность, как при отсутствии примесей. На рисунке приведены кривые  $\rho(E)$  в случае отсутствия примесей (пунктиром) и при наличии примесей (сплошной линией). Полученный результат легко понять, т.к. выбранный нами характер случайных примесей смещает левую границу разрешенной энергетической зоны вправо и тем самым размывает границу, в то время как положение правой границы от примесей не зависит. Запрещенные области в рассматриваемом случае не изменяются.

Поскольку  $N(E)$  является аддитивной величиной, то для энергий, близких к краю  $n$ -ой зоны  $E_n$ , можно написать:

$$N(E) = N(E_n) + N(E_n, E)$$

где  $N(E_n, E)$  — число состояний в области  $(E_n, E)$ . Это приводит естественно к формулам (I6), (I9) с заменой  $E_0$  на  $E_n$ .

Аналогичное решение можно провести для любого периодического потенциала  $V_0(x)$ , используя его конкретный вид для определения  $q$  и  $\varepsilon$  вместо формулы (I4).

Интересно отметить общий характер замыкания особенности вблизи края зоны полностью неупорядоченной системы и системы с дальним порядком.

Приём перенормировки основных параметров  $\varphi$  и  $\varepsilon$  с целью сохранения связи между фазами волновых функций типа (7) может быть использован и для другого предельного случая — очень больших концентраций примесей:  $\langle \nu \rangle \ll L_0$ . Пусть, например, потенциал примесей  $V(x)$  представляет собой гауссовский "белый шум":

$$\langle V(x) \rangle = 0; \quad \langle V(x) V(x') \rangle = \sigma^2 \delta(x-x') \quad (20)$$

Случайное поле (20) может быть представлено в виде [9]:

$$V(x) = \sum_k a_k \delta(x-x_k) \quad (21)$$

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 (20) получается в пределе:

$$a \rightarrow 0, \quad \gamma \rightarrow \infty, \quad \gamma a^2 = \text{const} = \frac{1}{2} \sigma^2 \quad (22)$$

В работе [8] было показано, что формула (9) сохраняется и в случае (21), а уравнение для  $\nu(z)$  имеет вид при  $V_0 \equiv 0$ :

$$\frac{k}{\gamma} \frac{d}{dz} [(1+z^2)\nu(z)] = \nu(z) - \frac{1}{2} \nu(z-\varepsilon) - \frac{1}{2} \nu(z+\varepsilon); \quad \varepsilon = a/k \quad (23)$$

откуда с помощью предельного перехода (22) и (23) следует результат работы [7]:

$$N(E) = \pi^{-2} \left\{ \left[ \text{Ai} \left( -\frac{k^2}{(\sigma^2/2)^{1/2}} \right) \right]^2 + \left[ \text{Bi} \left( -\frac{k^2}{(\sigma^2/2)^{1/2}} \right) \right]^2 \right\}^{-1} \quad (24)$$

где  $\text{Ai}$ ,  $\text{Bi}$  — функции Эйри. Формула (9) следует [8] из

$$N(E) = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \langle \Delta \varphi_k \rangle = \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^M \langle \varphi_k - \varphi_{k-1} \rangle \quad (25)$$

где  $M$  — число  $\delta$ -функций на длине решетки, а усреднение проводится по всем конфигурациям. Воспользуемся тем, что среднее расстояние между примесями согласно (22) стремится к нулю, тогда нетрудно получить:

$$N(E) = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} dx N(E, x) = \frac{1}{\pi L_0} \int_0^{L_0} dx \langle \Delta \varphi_k(x) \rangle \quad (26)$$

где  $N(E, x)$  вычисляется с помощью уравнений (23), (9), в которых параметр  $\varepsilon = \varepsilon(x)$ . Для модели Кронига-Пенни с помощью (14) можно

получить:

$$\varepsilon(x) = \frac{a}{k} \frac{f(x)}{\sin k L_0 \cdot \sin q L_0} \quad (27)$$

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

Это дает согласно (23)

$$N(E, x) = \pi^{-2} \left\{ [\text{Ai}(-\xi)]^2 + [\text{Bi}(-\xi)]^2 \right\}^{-1} \quad (28)$$

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

В частности, при  $V_0 \equiv 0$  имеем:  $\xi = (2/\sigma^2)^{2/3} k^2$  и из (26) сразу следует (24). Опуская громоздкое исследование формулы (28), решающую принципиально задачу приходим к  $\varphi(E)$ , 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  $\varepsilon(x)$ .

#### Л и т е р а т у р а

1. E. 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. F. Edwards. *Proc. Phys. Soc.*, 85, p. I № 543 (1965)
7. В. Г. Налрезин. *Phys. Rev.*, 139, 104A (1965)
8. Г. М. Заславский, В. Л. Покровский. Препринт ИЯФ СО АН СССР. 1966, ЖЭТФ (в печати).
9. M. A. Leivowitz. *Journ. Math. Phys.*, 4, 852 (1963)

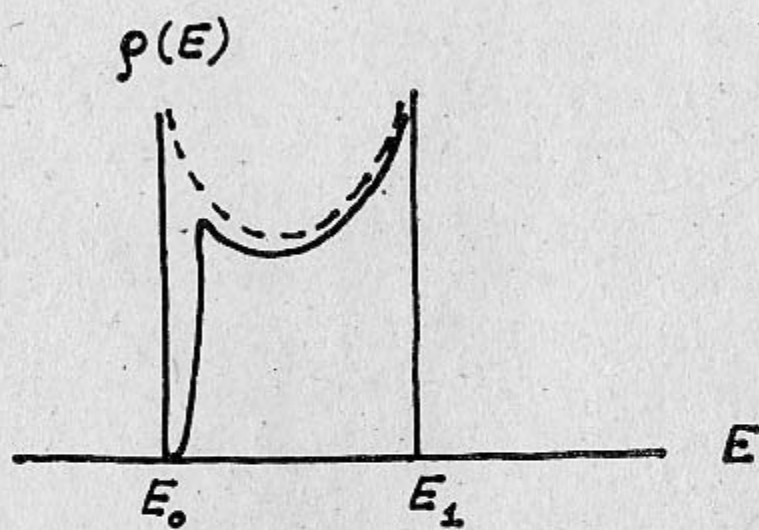


Рис. 1.

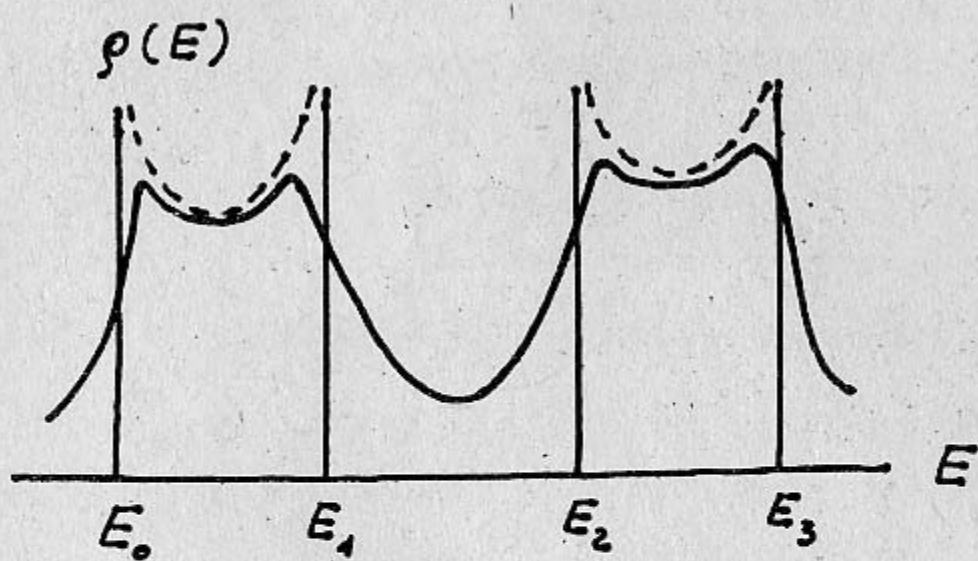


Рис. 2