О ПРОВОДИМОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНОЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ

© *А.Г.Моисеев*

Новосибирский государственный технический университет,
630092 Новосибирск, Россия
(Получена 13 января 1995 г. Принята к печати 26 января 1996 г.)

Изучены электронные состояния в одномерной зеркально-симметричной неупорядоченной бесконечной квантовой системе, которая описывается гамильтонианом Хаббарда. Число электронов в структуре равно числу узлов. Установлено, что при достаточно сильном взаимодействии между электронами все электронные состояния локализованы, а изучаемая квантовая система в основном состоянии является диэлектриком, у которого проводимость при определенной частоте внешнего однородного электрического поля обращается в бесконечность.

В работе [1] дан анализ проводимости одномерной неупорядоченной зеркально-симметричной системы при $T = 0\,\mathrm{K}$ в одноэлектронном приближении. Выбор такой структуры в качестве объекта исследования обусловливается несколькими факторами. С одной стороны, к их числу следует отнести пространственную неоднородность системы и наличие в ней идеальной корреляции потенциала в точках x и $-x$ при $x \to \infty$. Эти два свойства отличают неупорядоченную систему, рассмотренную в [1], от неупорядоченных систем, изучаемых в [2]. Неупорядоченные системы, исследуемые в [2], характеризуются пространственной однородностью и отсутствием корреляции потенциала в бесконечно удаленных друг от друга точках. С другой стороны, проводимость зеркально-симметричной цепочки из неупорядоченных потенциалов ям определяется резонансными переходами между четными и нечетными электронными состояниями с одинаковыми размерами корреляции. Электронные состояния такого типа вообще отсутствуют в пространственно-однородных системах. Совершенно очевидно, что учет взаимного отталкивания между электронами в зеркально-симметричной системе может привести к пространственной перегруппировке электронов, а это влечет за собой изменение частотной зависимости проводимости.

Цель настоящей работы — исследование электронной проводимости неупорядоченной пространственно неоднородной системы при $T = 0\,\mathrm{K}$ с учетом электрон-электронного взаимодействия.

В качестве гамильтониана, описывающего систему, выбирается гамильтониан Хаббарда зеркально-симметричной системы:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{n=\infty} \varepsilon_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} + \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}) +$$
$$+ t\sum_{n=-\infty}^{n=\infty} (\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n+1;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n+1;\downarrow} + \hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n-1;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n-1;\downarrow}) +$$
$$+ U\sum_{n=1}^{n=\infty} (\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow}\hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow}\hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}), \qquad (1)$$

где ε_n — случайны, а $U > 0$. Такой гамильтониан обеспечивает идеальную, отличную от нуля, корреляцию величин ε_n и ε_{-n} при $n \to \infty$ и учитывает взаимодействие между электронами.

Число электронов в исследуемой системе полагается равным числу узлов. На параметры ε_n, t, U, входящие в гамильтониан, накладываются условия $t \ll U$, $\varepsilon_n - \varepsilon_m \ll U$. Если в такой структуре хотя бы два электрона попадают на один узел, то энергия системы увеличивается на величину, примерно равную U. Это является энергетически невыгодным, и электроны в основном состоянии равномерно распределены по узлам.

Для расчета собственных функций гамильтониана (1) можно воспользоваться эвристическим подходом, основы которого даны в работе [3]. Согласно [3], волновые функции стационарных состояний пространственно однородной системы при отсутствии взаимодействия между электронами ($U = 0$) и большом разбросе $\Delta\varepsilon$ параметров $\{\varepsilon_n\}$ ($\Delta\varepsilon \gg t$) сильно локализованы, и каждое состояние представляет фактически состояние электрона в одной из ям.

При переходе к зеркально-симметричной системе ситуация изменяется, и теперь каждое стационарное состояние определяется резонансными узлами, энергии которых ε_n и ε_m близки друг к другу. Поскольку в исследуемой системе $\varepsilon_n = \varepsilon_{-n}$, то каждая волновая функция гамильтониана (1) при $U = 0$ представляет состояние электрона на узлах $-n$ и n. Следует отметить, что волновые функции, представляющие состояние электрона на узлах $-n$, n и $-m$, m ($n \neq m$), диагонализируют гамильтониан (1) не только при $U = 0$, но и при $U > 0$, поскольку при $n \neq m$ эти волновые функции слабо перекрываются.

Таким образом, в качестве собственных векторов гамильтониана (1) при соблюдении условий ($t \ll \Delta\varepsilon \ll U$) можно выбрать собственные векторы модельного гамильтониана:

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{n=\infty} \varepsilon_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} + \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}) +$$
$$+ \sum_{n=1}^{n=\infty} t_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow}) +$$
$$+ \sum_{n=1}^{n=\infty} U(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow}\hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow}\hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}). \qquad (2)$$

В гамильтониане (2) есть слагаемые, ответственные за переходы электронов только от узла $-n$ к узлу n и обратно. Этот гамильтониан можно представить как сумму гамильтонианов

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{n=\infty} \hat{H}_n, \tag{3}$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_n = \varepsilon_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} + \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}) + \\ + t_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow}) + \\ + U(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow}\hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} + \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow}\hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}). \end{aligned} \tag{4}$$

Каждое слагаемое $\hat{H}_n$ суммы (3) действует только на «свою» пару узлов $(-n, n)$. Это позволяет представить собственные векторы гамильтониана (3) как собственные векторы операторов $\hat{H}_n$ (4), а всю неупорядоченную систему рассматривать как совокупность двухузельных невзаимодействующий между собой подсистем, на каждую из которых приходится два электрона. Спектр операторов $\hat{H}_n$ при $t_n \ll U$ имеет вид:

$$|\psi_{n1}\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/2^{1/2} + [(|0\updownarrow\rangle + |\updownarrow 0\rangle)/2^{1/2}](-2t_n/U),$$
$$E_{n1} = 2\varepsilon_n - 4t_n^2/U, \tag{5а}$$

$|\psi_{n1}\rangle$ — основное состояние;

$$|\psi_{n2}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad |\psi_{n3}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle, \quad |\psi_{n4}\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/2^{1/2},$$
$$E_{n2} = E_{n3} = E_{n4} = 2\varepsilon_n,$$
$$|\psi_{n5}\rangle = (|0\updownarrow\rangle - |\updownarrow 0\rangle)/2^{1/2}, \quad E_{n5} = 2\varepsilon_n + U,$$
$$|\psi_{n6}\rangle = [(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/2^{1/2}](2t_n/U) + (|0\updownarrow\rangle + |\updownarrow 0\rangle)/2^{1/2},$$
$$E_{n6} = 2\varepsilon_n + 0.5[U + (U^2 + 16t_n^2)^{1/2}], \tag{5б}$$

$|\psi_{n2}\rangle$, $|\psi_{n3}\rangle$, $|\psi_{n4}\rangle$, $|\psi_{n5}\rangle$, $|\psi_{n6}\rangle$ — возбужденные состояния. При $T = 0\,\text{K}$ каждая из подсистем находится в состоянии $|\psi_{n1}\rangle$.

В символе $|\,\rangle$ знак слева указывает состояния спинов электронов на узле $-n$, а знак справа указывает состояния спинов электронов на узле n. Следует отметить, что волновые функции, соответствующие собственным векторам (5), локализованы в «x»-представлении. Эффективный размер этих волновых функций определяется расстоянием между узлами $-n$ и n. Этот размер равен величине $2a_n$, где a_n — координата узла n (при $n > 0$ $a_n > 0$).

Для расчета проводимости введем оператор, описывающий воздействие однородного электрического поля на неупорядоченную зеркально-симметричную систему,

$$\hat{W} = \begin{cases} 0, & t < 0, \\ \hat{W}_E \cos\omega t, & t > 0, \end{cases} \tag{6}$$

где

$$\hat{W}_E = -q_e E_0 \sum_{n=1}^{n=\infty} a_n(\hat{C}^+_{n;\uparrow}\hat{C}_{n;\uparrow} + \hat{C}^+_{n;\downarrow}\hat{C}_{n;\downarrow} - \hat{C}^+_{-n;\uparrow}\hat{C}_{-n;\uparrow} - \hat{C}^+_{-n;\downarrow}\hat{C}_{-n;\downarrow}).$$

Поскольку при $T = 0\,\text{K}$ все состояния $|\psi_{n1}\rangle$ заняты, то только матричные элементы $\langle\psi_{n5}|\hat{W}_E|\psi_{n1}\rangle$ отличны от нуля:

$$\langle\psi_{n5}|\hat{W}_E|\psi_{n1}\rangle = q_e E_0 4a_n t_n/U. \tag{7}$$

Матричный элемент (7) позволяет вычислить вероятность перехода в единицу времени состояния $|\psi_{n1}\rangle$ в состояние $|\psi_{n5}\rangle$ при $t \to \infty$:

$$P(a_n) = \frac{1}{4}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\psi_{n5}|\hat{W}_E|\psi_{n1}\rangle|^2\delta(E_{n5} - E_{n1} - \hbar\omega), \tag{8}$$

где $E_{n5} - E_{n1} = U + 4t_n^2/U$, $t_n^2 = t^2(a_n) = \Delta\exp(-\alpha a_n)$, в дальнейшем индекс n у a_n опущен.

Энергия, поглощаемая при этом переходе, равна

$$\hbar\omega P(a). \tag{9}$$

Формула (9) позволяет рассчитать энергию, поглощаемую всей системой в единицу времени:

$$E = n_e\int_{a=0}^{a=\infty}\hbar\omega P(a)da. \tag{10}$$

Здесь n_e — среднее число электронов (узлов), приходящихся на единицу длины. После интегрирования (1) выражение для поглощаемой мощности принимает вид

$$E = \frac{2\pi}{\hbar}(q_e E_0 a_0)^2\frac{n_e\hbar\omega}{\alpha U}, \tag{11}$$

где a_0 — корень уравнения,

$$\hbar\omega = U + 4t^2(a)/U. \tag{12}$$

Отсюда следует, что величина $\hbar\omega$ должна быть больше величины U, но меньше величины $U+4t^2(a)/U$, здесь a — координата узла, ближайшего к центру. Только в этом случае поглощаемая мощность будет отлична от нуля.

Физический смысл a_0 состоит в том, что оно определяет размеры области

$$-a_0 < x < a_0, \tag{13}$$

в которой происходит поглощение мощности неупорядоченной системой.

Проводимость в области (13) может быть определена как мощность, поглощаемая в единичном интервале длины под действием единичного электрического поля

$$\sigma(\omega) = 2E/E_0^2 2a_0. \tag{14}$$

Подстановка (11) в (14) дает возможность представить проводимость в следующем виде:

$$\sigma(\omega) = \pi \frac{q_e^2}{\hbar} 2a_0 \frac{n_e \hbar\omega}{U}. \tag{15}$$

Анализ формул (12) и (15) показывает следующее.

1. Проводимость, рассчитанная на основе модельного гамильтониана (2), в интервале частот $\omega < U/\hbar$ равна нулю, и неупорядоченная цепочка является диэлектриком.

2. Проводимость (15) в диапазоне

$$U/\hbar < \omega < [U + 4t^2(a_1)/U]/\hbar \tag{16}$$

пропорциональна частоте и числу электронов $(n_e 2a_0)$ в области размером $2a_0$.

3. Из уравнения (12) следует, что при $\omega \to U/\hbar$ величина $a_0 \to \infty$ и проводимость так же обращается в бесконечность.

4. Формулу для проводимости (15) можно сравнить с формулой для электронной проводимости неупорядоченной зеркально-симметричной системы, полученной в приближении независимых электронов [1]. В случае невзаимодействующих электронов низкочастотная проводимость пропорциональна первой степени частоты внешнего однородного электрического поля и плотности симметричных электронных состояний на уровне Ферми.

Таким образом, учет взаимодействия между электронами в неупорядоченных зеркально-симметричных системах приводит к существенному изменению зависимости проводимости от частоты. Исследуемая апериодическая система, по-видимому, может быть использована в качестве источника электромагнитного излучения при условии, что параметр $2a_0$ имеет макроскопическое значение.

Автор благодарит М.В. Энтина за внимание к работе и обсуждение результатов.

Список литературы

[1] А.Г. Моисеев, М.В. Энтин. ФТП, **28**, 1282 (1994).

[2] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. *Введение в теорию неупорядоченных систем* (М., Наука, 1982).

[3] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).

Редактор Т.А. Полянская

On the conductivy of a disordered space in homogeneous quantum system

A.G. Moiseev

Novosibirsk State Technical University, 630092 Novosibirsk, Russia.

A study has been made of electron states in a one-dimensional mirror-symmetrical disordered infinite quantum system which is described by the Hubbard hamiltonian. The number of electron in the structure is equal to the number of ions. It is shown that for a rather strong interaction between electrons all electronic states are localized and the quantum system under consideration in the ground state behaves like the dielectric the conductivity of which at a certain value of the frequncy of external homogeneous electrical field becomes infinite.