УДК 538.95—405

ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ В ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЕ С КОМПЛЕКСНЫМ СЛУЧАЙНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Ю. Н. Гартштейн

Изучается поведение плотности электронных состояний в одномерной двухзонной модели типа Дирака, в которой параметр щели является комплексной случайной величиной.

Одноэлектронный гамильтониан типа Дирака

$$h(x) = -i(\partial/\partial x)\sigma_3 + \Delta^*(x)\sigma_+ + \Delta(x)\sigma_- = -i(\partial/\partial x)\sigma_3 + \Delta_1(x)\sigma_1 + \Delta_2(x)\sigma_2 \qquad (1)$$

широко используется при описании квазиодномерных проводников и полупроводников [1, 2] (мы положили фермиевскую скорость равной 1, σ — матрицы Паули, $\Delta_{1,2}$ действительны). При наличии примесей или других неоднородностей, а также при учете влияния колебаний решетки, действие которых в одномерных системах эквивалентно наличию статического шума [1, 3], параметр щели $\Delta(x)$ становится случайно флуктуирующим. Отвлекаясь от природы неупорядоченности, рассмотрим плотность электронных состояний, когда случайные компоненты потенциала моделируются гауссовским белым шумом. Точное решение такой задачи для действительного потенциала $\Delta(x)$ было получено Овчинниковым и Эрихманом [4]. Нас интересует случай комплексных $\Delta(x)$.

Простой пример такой ситуации возникает в так называемых комбинированных пайерлсовских диэлектриках [1], где $\Delta(x)=\Delta_e+\Delta_i(x)\exp(i\varphi)$, параметры Δ_e и φ фиксированы структурой кристалла, а $\Delta_i(x)$ зависит от смещений решетки. Этот случай без потери общности описывается (1) с $\Delta_2(x)=\bar{\Delta}_2$ и $\Delta_1(x)=\bar{\Delta}_1+\eta(x)$, $\langle\eta(x)\eta(x')\rangle=2D\delta(x-x')$. При этом флуктуирующими оказываются и амплитуда, и фаза параметра щели. Проведем расчет методом фазового формализма (см. изложение в [5]) в представлении технически несколько более удобном, чем используемое в [4, 5]. Преобразование (1) с помощью унитарного оператора $\exp(i\pi\sigma_1/4)$ приводит к гамильтониану

$$h(x) = i(\partial/\partial x)\sigma_2 + \Delta_1(x)\sigma_1 + \Delta_2(x)\sigma_3, \qquad (2)$$

который достаточно рассмотреть на классе действительных собственных функций $f=(f_1, f_2)$ с нулевыми граничными условиями для f_1 [4, 5]. Для динамической переменной $z=f_2/f_1$, согласно уравнению $hf=Ef$, имеем

$$dz/dx = E - \Delta_2 + z^2(E+\Delta_2) - 2\Delta_1 z,$$

откуда обычным образом следует уравнение Фоккера—Планка для плотности вероятности P величины z в точке x в форме $\partial P(x, z)/\partial x = -\partial J_E(x, z)/\partial z$. В пределе $x\to\infty$ для плотности потока J получаем здесь $J(E)=\lim J_E(x, z)$ с

$$J(E) = P(E - \bar{\Delta}_2 + z^2(E+\bar{\Delta}_2) - 2\bar{\Delta}_1 z) - 4Dz(d/dz)zP. \qquad (3)$$

Удобнее решать дифференциальное уравнение для величины $Q(z)=zP(z)$

$$\frac{dQ}{dz}=\frac{Q}{4D}\left(E+\bar{\Delta}_2+\frac{E-\bar{\Delta}_2}{z^2}-\frac{2\bar{\Delta}_1}{z}\right)-\frac{J(E)}{4Dz}. \qquad (4)$$

Ограничиваясь ввиду симметрии состояниями с $E>0$, легко видеть, что решение (4), удовлетворяющее условиям конечности, положительной определенности и интегрируемости $P(z)$, существует только при $E>|\bar{\Delta}_2|$. При этом $Q(z)=\int\limits_z^{\infty}F(z,\ y)\,dy$ для $z>0$ и $\int\limits_z^{0}F(z,\ y)\,dy$ для $z<0$, где $F(z,\ y)=J(E)\exp(\varphi(z)-\varphi(y))/4Dy$ и

$$\varphi(z)=-\frac{\bar{\Delta}_1}{2D}\ln|z|+\frac{E+\bar{\Delta}_2}{4D}z-\frac{E-\bar{\Delta}_2}{4D}\frac{1}{z}.$$

Подстановками типа $z=\exp(u)$, $y=\exp(v)$ условие нормировки $\int\limits_{-\infty}^{\infty}P(z)\times$ $\times\,dz=1$ теперь легко свести к интегралу, аналогичному возникшему в расчетах [4], с результатом

$$J(E)=4D/\pi^2\,(J_{\nu}^2(\varepsilon)+Y_{\nu}^2(\varepsilon)),$$

где J_{ν}, Y_{ν} — функции Бесселя; $\nu=\bar{\Delta}_1/2D$; $\varepsilon=E'/2D$; $E'=(E^2-\bar{\Delta}_2^2)^{1/2}$. Таким образом, для числа уровней с энергией, меньшей E, $N(E)=J(E)$ [5], мы получили

$$N(E)=N_0(E'), \qquad (5)$$

где $N_0(E)$ — результат [4] для случая $\bar{\Delta}_2=0$. Соответственно для плотности состояний $\rho(E)=\rho_0(E')E/E'$. Отсюда, в частности, следует, что вблизи границы спектра $E=\bar{\Delta}_2$ переход от режима $\rho(E)\to 0$ к режиму $\rho(E)\to\infty$ имеет место при $\nu=1$, а не при $\nu=1/2$, как в [4]. При $\nu=0$ расходимость $\rho(E\to\bar{\Delta}_2)$ более сильная, чем дайсоновская. Любопытно, что сжатие спектра по правилу (5) при случайном потенциале $\Delta(x)$ происходит так, как это было бы для однородного Δ. Эта модель демонстрирует наличие истинной щели $2\bar{\Delta}_2$ в спектре, что, разумеется, имеет место независимо от вида потенциала $\Delta_1(x)$.

Рассмотрим теперь другую модель, в которой сам случайный процесс становится комплексным, будем считать в (2) $\Delta_1(x)=\bar{\Delta}_1+\eta_1(x)$ и $\Delta_2(x)=\eta_2(x)$, где η_1, η_2 — два независимых действительных белых шума; $\langle\eta_i(x)\,\eta_j(x')\rangle=2D_i\delta_{ij}\delta(x-x')$. В качестве явного примера также можно привести системы пайерлсовского типа, в которых димеризация решетки наводится фононами двух сортов — по узлам и по связям [6]. В общем случае при этом в уравнении типа (3) при производной dP/dz фигурирует положительно определенная форма четвертого порядка, особенности же появляются только при D_1 или D_2, равном нулю. Весьма любопытным оказывается «изотропный» случай $D_1=D_2=D$, когда вместо (3) имеем

$$J(E)=P\,(E\,(z^2+1)-2\bar{\Delta}_1 z)-D\,(z^2+1)\,(d/dz)\,(z^2+1)\,P.$$

Удивительно, но точно такое же уравнение получается в совершенно другой модели — с флуктуирующей диагональной энергией, где гамильтониан (1) дополняется членом $U(x)\cdot 1$ — белым шумом с тем же коэффициентом D в корреляторе. При $D_1\neq D_2$ поэтому изучаемая система с флуктуирующими фазой и амплитудой параметра щели (в смысле плотности состояний) оказывается эффективно эквивалентной системе с флуктуирующими диагональной энергией (коэффициент D_2) и амплитудой щели (коэффициент D_1-D_2). Эта задача также была рассмотрена Овчинниковым и Эрихманом [4] с тем, правда, отличием, что коэффициент D_1-D_2 у нас формально может становиться отрицательным; при $D_1=0$ это приводит к открытию щели $2\bar{\Delta}_1$. В других случаях щель в спектре отсутствует. Рассмотрение еще более общей ситуации, когда и $\bar{\Delta}_1$ и $\bar{\Delta}_2$ отличны от нуля, весьма громоздко.

Таким образом, мы показали, что поведение плотности электронных состояний в системах с комплексным случайным параметром щели, что может, например, реализовываться в сопряженных полимерах или в органических кристаллах, фактически описывается полученными ранее в [4] выражениями с эффективными параметрами. Мы не выясняли, в какой мере это связано со свойствами самой модели типа Дирака, а в какой — с использованием простых δ-коррелированных процессов.

Список литературы

[1] Brazovskii S. A., Kirova N. N. // Sov. Sci. Rev. Sect. A Physics / Ed. I. M. Khalatnikov. N. Y., 1984. V. 5. P. 99—264.
[2] Abrikosov A. A., Ryzhkin I. A. // Adv. Phys. 1978. V. 27. N 2. P. 147—230.
[3] Бразовский С. А., Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. № 6. С. 2338—2348.
[4] Овчинников А. А., Эрихман Н. С. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. № 2. С. 650—661.
[5] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., 1982. 358 с.
[6] Kivelson S. // Phys. Rev. Ser. B. 1983. V. 28. N 5. P. 2653—2658; Horovitz B. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1985. V. 120. P. 1—8.

Отдел теплофизики АН УзССР
Ташкент

Поступило в Редакцию
6 сентября 1989 г.