Письма в ЖЭТФ, том 18, вып. 2, стр. 145 – 147 *29 июля 1973 г.*

ОБ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ СПЕКТРЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ ТРЕХМЕРНОЙ СИСТЕМЫ

А. А. Овчинников

Недавно Бычков [1] точно рассмотрел плотность энергетического спектра одномерной системы с потенциальной энергией в виде $U(x) = \sum_n \lambda_n \delta(x - x_n)$, где точки x_n расположены регулярно на оси X, а λ_n – случайные величины, распределенные по закону

$$P(\lambda_n) = \frac{\lambda_2}{\pi[(\lambda_n - \lambda_1)^2 + \lambda_2^2]}. \tag{1}$$

Цель нашей работы – обобшение результатов [1] на случай трехмерной решетки с произвольным одноцентровым короткодействующим знакоопределенным потенциалом $V(r)$. Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$H = -\Delta_{\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{n}} \lambda_{\mathbf{n}} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}). \tag{2}$$

Суммирование происходит по точкам трехмерной решетки, λ_n распределены по (1). Плотность уровней $\rho(E)$ равна

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi V} \operatorname{Im} \operatorname{Sp} < \frac{1}{H - E - i\delta} >, \tag{3}$$

V – объем системы.

Запишем Гриновскую функцию системы $G(r_1, r_2; t)$ с помощью Фейнмановского континуального интеграла [2]

$$G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; t) = \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} d\mathbf{r}(t) \exp i \{ \int_0^t \dot{\mathbf{r}}^2(\tau)\, d\tau + \sum_{\mathbf{n}} \lambda_{\mathbf{n}} \int_0^t V(\mathbf{r}(\tau) - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})\, d\tau \}, \tag{4}$$

и выполним в (4) явно усреднение по распределению (1). В результате интегрирования получим опять экспоненциальный континуальный интеграл, вычисление которого эквивалентно решению уравнения Шредингера с комплексным потенциалом [1])

$$\widetilde{H} = -\Delta_r + \sum_n [\lambda_1 V(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n) + i\lambda_2 |V(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)|]. \qquad (5)$$

Итак, для определения усредненной по (1) Гриновской функции системы необходимо решить обычное уравнение Шредингера для регулярной решетки с оптическим одноцентровым потенциалом $\lambda_1 V(\mathbf{r}) + i\lambda_2|V(\mathbf{r})|$ [2]).

В качестве примера рассмотрим потенциал малого радиуса, для которого эффективно только рассеяние s-волны. Задачу о рассеянии на трехмерной решетке в таких условиях рассматривали Каган и Афанасьев [3]. Производя аналогичные вычисления получим

$$\rho(E) = \frac{1}{8\pi^4}\int \frac{d^3q\, M_2(q, E)}{[q^2 - E + M_1(q, E)]^2 + M_2^2(q, E)}, \qquad (6)$$

где

$$M_1 + iM_2 = \frac{4\pi}{V_0}\,\frac{1}{-\kappa_1 + i\kappa_2 + D(q, E)}, \qquad (7)$$

$$D(q, E) = \frac{4\pi}{V_0}\left\{\sum_{K\neq 0}\frac{1}{(q+K)^2 - E} - \frac{V_0}{8\pi^3}\int\frac{d^3q'}{q'^2}\right\} \qquad (8)$$

Здесь V_0 – объем ячейки. Суммирование в (8) производится по векторам обратной решетки. $\kappa_1 - i\kappa_2$ связано с $\lambda_1 + i\lambda_2$ через решение уравнения Шредингера с потенциалом $\lambda_1 V(\mathbf{r}) + i\lambda_2|V(\mathbf{r})|$ во внутренней области [4]. Если $\chi(r)$ ($\chi(0) = 0$) есть решение уравнения

$$-\frac{d^2\chi}{dr^2} + [\lambda_1 V(r) + i\lambda_2|V(r)|]\chi = 0, \qquad (9)$$

то

$$\kappa_1 - i\kappa_2 = \frac{\partial}{\partial r}\ln\chi(r)\Big|_{r=R_0}. \qquad (10)$$

R_0 – радиус действия потенциала $V(\mathbf{r})$. В частности $\kappa_2 = 0$, когда $\lambda_2 = 0$.

Таким образом, плотность состояний выражается в этой модели в квадратурах. Интеграл (6) может быть определен, например, численно

[1]) Именно здесь требуется знакоопределенность $V(r)$.

[2]) Приведенный вывод, разумеется, формален. Для более строгого получения этого рецепта необходимо было бы доказать что Гриновская функция для гамильтониана (2), $G(r, r', t\,|\,\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_4)$, как функция всех переменных λ_i аналитична по каждой переменной в верхней или нижней полуплоскости комплексного λ_i (при фиксированных остальных переменных). Такое доказательство для потенциала произвольного вида вряд ли возможно. Однако, случай одномерных δ-образных потенциалов, разобранный в [1] показывает, что такие потенциалы существуют.

для данной конкретной решетки. Из (6) можно получить несколько общих заключений.

1. При $E > 0$ плотность $\rho(E)$ имеет особенности корневого типа в точках $E = \mathbf{K}^2/4$, где $\mathbf{K}$ – произвольный вектор трехмерной обратной решетки ($\mathbf{K} \neq 0$).

$$\rho(E) \approx A_{\mathbf{K}} \sqrt{|E - \mathbf{K}^2/4|}, \quad E \to \mathbf{K}^2/4, \tag{11}$$

т. е. как и в одномерном случае плотность уровней сохраняет "память" о решетке [1].

2. При $E \to -\infty$

$$\rho(E) \approx \frac{\kappa_2}{2\pi V_0 |E|^{3/2}} . \tag{12}$$

Такая асимптотика соответствует распределению по энергии связи для одной изолированной ямы.

3. Если $\kappa_1 < 0$ и $|\kappa_1| \to \infty$, тогда в идеальной решетке (т. е. при $\lambda_2 = 0$) имеется глубокая зона с дисперсией

$$\epsilon_a(\mathbf{q}) = -\kappa_1^2 + \frac{4|\kappa_1|}{\pi} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_n} \frac{e^{-|\kappa_1 \mathbf{R}_n|}}{|\mathbf{R}_n|} . \tag{13}$$

Суммирование в (13) достаточно оставить только по ближайшим соседям. В неидеальном случае зона размывается и плотность соответствующая ей, будет иметь вид

$$\rho(E) = \frac{1}{8\pi^4} \int_{\Omega} \frac{d^3q \, 2|\kappa_1|\kappa_2}{[E - \epsilon_a(\mathbf{q})]^2 + 4|\kappa_1|^2\kappa_2^2} . \tag{14}$$

Здесь интегрирование по $\mathbf{q}$ ведется в пределах одной зоны Бриллюэна Ω. Из этого выражения очевидно, что особенности типа Ван-Хова [5] в плотности состояний $\rho(E)$ отсутствуют.

Физико-химический институт
им. Л.Я.Карпова

Поступила в редакцию
18 апреля 1973 г.
После переработки
19 июня 1973 г.

Литература

[1] Ю.А.Бычков. Письма в ЖЭТФ, 17, 266, 1973.

[2] Р.Фейнман, А.Хибс. Квантовая механика и интегралы по траекториям, М., изд. Мир, 1968.

[3] Ю.Каган. А.М.Афанасьев. ЖЭТФ, 50, 271, 1966.

[4] А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, М., изд. Наука, 1971.

[5] А.Марадудин, Э.Монтролл, Дж.Вейсс. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении, М., изд. Мир, 1965.