

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОРДЕНА ЛЕНИНА

ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

имени П. Н. ЛЕБЕДЕВА

Препринт №63

Отдел теоретической физики им. И. Е. Тамма

М. В. Садовский

К теории "жидких полупроводников"

T - 06260

Подписано в печать 19 апреля 1973 года

Заказ № 266. Тираж 100 экз.

Отпечатано на ротационной машине в ФИАН СССР

Москва В-312, Ленинский проспект, 53.

Москва, 1973 г.

М.В.Садовский

К теории "Жидких полупроводников"

Аннотация

В работе рассматривается плотность состояний электронов в жидкости. Найдено модельное выражение для одноэлектронной функции Грина, приводящее к плотности состояний с характерной "псевдощелью", возникающей из-за сильного рассеяния электронов в области, соответствующей запрещенной зоне кристалла. Показано, что в этой области энергий понятие спектра элементарных возбуждений теряет смысл.

I. Введение

В последние годы проводились широкие экспериментальные исследования расплавов большинства известных полупроводников. При этом выяснилось (см. обзоры /I-4/), что по своим кинетическим свойствам в жидком состоянии полупроводники могут быть разделены приблизительно на три группы. К первой относятся такие вещества как Ge , $InSb$ и другие $A_{III}B_V$, которые при переходе в жидкое состояние дают расплавы с чисто металлическими свойствами. Повидимому, это связано с тем, что при плавлении в этих веществах происходит разрушение не только дальнего, но и "ближнего" порядка, соответствующего данному кристаллу (изменяется, например, координационное число). Вторую группу образуют вещества типа $PbTe$, $SnTe$, $PbSe$, In_2Te_3 , Ga_2Te_3 и др. представляющие из себя в кристаллическом состоянии типичные полупроводники (с узкой запрещенной зоной). При плавлении их электропроводность по абсолютной величине и температурному ходу сохраняет практически то же поведение, что и в соответствующем кристалле. Знак термоэдс, как правило, свидетельствует о проводимости p-типа. Однако по эффекту Холла они проявляют типично металлические свойства: константа Холла почти не зависит от температуры, знак ее соответствует проводимости n-типа, а по абсолютной величине она несколько превышает значение для металла с двумя свободными электронами на атом. Эти вещества, именуемые обычно "жидкими полупроводниками", образуют, таким образом, группу промежуточную между типичными металлами и полупроводниками.

Их свойства, по всей видимости, могут быть рассмотрены в рамках приближения почти свободных электронов, с учетом сильного рассеяния в области энергий, совпадающей с запрещенной зоной соответствующего кристалла, и обусловленного сохраняющимся "ближним" порядком того же типа. (Координационное число не меняется при плавлении, локально сохраняется структура, того же типа, что и в кристалле). Третью группу образуют вещества типа GeS , SrS , V_2O_5 и др. с очень малой электронной подвижностью, которые следует, по-видимому, рассматривать в приближении "сильной связи" электронов с ионами.

Настоящая работа посвящена рассмотрению второй группы веществ, т.е. "жидких полупроводников" и в ней делается попытка понять, что может представлять из себя их "зонная структура". Оказывается, что при определенных модельных предположениях удается в рамках картины "почти свободных" электронов, рассеивающихся на слабом псевдопотенциале ионов, получить плотность электронных состояний с характерной "псевдощелью", типа предполагавшейся в работах Мотта и других авторов /1/. При этом ее появление вызвано упомянутым сильным рассеянием, что приводит к невозможности введения спектра элементарных возбуждений в рассматриваемой области энергий.

2. Одноэлектронная функция Грина.

Гамильтониан взаимодействия электрона с ионами жидкости запишем в виде:

$$H_{int} = \frac{1}{N} \sum_{p,q} \langle p+q|V|p \rangle a_{p+q}^+ a_p \rho_q \quad (2.1)$$

$$\text{где } \rho_q = \sum_i e^{-iqR_i} \quad (2.2)$$

Фурье-компонента плотности ионов. (R_i - положения ионов, зависящие, вообще говоря, от времени);

$$\langle p+q|V|p \rangle = \frac{1}{\Omega_0} \int e^{-i(p+q)z} V(z) e^{ipz} d^3z \quad (2.3)$$

матричный элемент ионного псевдопотенциала. Подчеркнем, что $V(z)$ является нелокальным оператором /5/, так что (2.3) зависит не только от q , но в общем случае, и от p . Для сферически симметричного псевдопотенциала остается зависимость от $|q|$, $|p|$ и $|p+q|$, т.е. и от взаимной ориентации векторов p и q . a_p^+ и a_p - операторы рождения и уничтожения электрона. Ω_0 - объем, приходящийся на один ион.

Введем одноэлектронную функцию Грина в температурной технике Мацубары:

$$G(p\tau) = -\langle T_\tau a_p(\tau) a_p^+(0) \rangle \quad (2.4)$$

а также функцию Грина ионной подсистемы:

$$F(q\tau) = -\langle T_\tau \rho_q(\tau) \rho_q^+(0) \rangle \quad (2.5)$$

Для фурье-образа (2.5) имеем спектральное представление /6/:

$$F(q\omega_m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(q\omega')}{\omega' - i\omega_m} \quad (2.6)$$

$$\omega_m = 2\pi m T \quad (T - температура)$$

где

$$A(q\omega) = -Z^{-1} \sum_{mn} e^{-\frac{E_n}{T}} |(\rho_q)_{nm}|^2 \{1 - e^{-\frac{\omega_{mn}}{T}}\} \delta(\omega - \omega_{mn}) \quad (2.7)$$

$$\omega_{mn} = E_m - E_n; (\rho_q)_{nm} = \langle n | \rho_q | m \rangle = (\rho_q^+)_{mn}$$

$$Z = \sum_m e^{-\frac{E_m}{T}}; m, n - \text{нумеруют точные уровни ионной подсистемы.}$$

Далее введем динамический форм-фактор жидкости /7/:

$$S(q\omega) = Z^{-1} \sum_{mn} |(\rho_q)_{nm}|^2 e^{-\frac{E_n}{T}} \delta(\omega - \omega_{mn}) \quad (2.8)$$

Сравнивая (2.7) и (2.8) видим, что:

$$A(q\omega) = S(q\omega) \{e^{-\frac{\omega}{T}} - 1\} \quad (2.9)$$

Простейшие самосогласованные уравнения для определения одноэлектронной функции Грина имеют вид:

$$G(\epsilon_n p) = \{i\epsilon_n - \bar{\zeta}_p - \sum (\epsilon_n p)\}^{-1} \quad (2.10)$$

$$\epsilon_n = (2n+1)\pi T; \bar{\zeta}_p = \frac{p^2}{2m} - \mu$$

$$\sum (\epsilon_n p) = -\frac{T}{N^2} \sum_q |K_{p+q}|^2 |V/p|^2 \sum_m F(q\omega_m) G(\epsilon_n + \omega_m p + q) \quad (2.11)$$

(см. диаграмму Рис. I (a)). Используя (2.6) и (2.9) имеем:

$$\sum (\epsilon_n p) = -\frac{T}{N^2} \sum_q |K_{p+q}|^2 |V/p|^2 \sum_{m=-\infty}^{\infty} \int d\omega' \frac{S(q\omega')}{\omega' - i\omega_m} \times \{e^{-\frac{\omega'}{T}} - 1\} \{i\epsilon_n + i\omega_m - \bar{\zeta}_{p+q} - \sum (i\epsilon_n + i\omega_m; p+q)\}^{-1} \quad (2.12)$$

Дальнейшие вычисления без знания конкретного вида форм-фактора $S(q\omega)$ затруднительны. В Приложении I мы рассмотрим модель, описывающую динамику ионной подсистемы жидкости вблизи точки кристаллизации. Здесь же мы учтем, что характерные час-

тоты (на которых отличен от нуля $S(q\omega)$) удовлетворяют в жидкости условию $\frac{\omega}{T} \ll 1$, что позволяет учесть в (2.12) только слагаемое с $m=0$ (т.е. пренебречь "неупругостью").

Тогда:

$$\sum (\epsilon_n p) \approx \frac{1}{N^2} \sum_q |K_{p+q}|^2 |V/p|^2 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(q\omega) \{i\epsilon_n - \bar{\zeta}_{p+q} - \sum (i\epsilon_n; p+q)\}^{-1} \quad (2.13)$$

$$\approx \frac{1}{N} \sum_q |K_{p+q}|^2 |V/p|^2 S(q) \{i\epsilon_n - \bar{\zeta}_{p+q} - \sum (i\epsilon_n; p+q)\}^{-1}$$

(см. диаграмму Рис. I (б)), где

$$S(q) \equiv \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(q\omega) \quad (2.14)$$

- структурный фактор жидкости /7/, экспериментально определяемый из данных по упругому рассеянию рентгеновских лучей или нейтронов. Его типичное поведение в жидкости представлено на Рис. 2. Таким образом одноэлектронная функция Грина определяется уравнениями (2.10) и (2.13), образующими самосогласованное приближение Эдвардса /8/. Используемое Эдварсом усреднение по всевозможным ионным конфигурациям неявно содержится в определениях (2.7) и (2.8), где производится усреднение по каноническому ансамблю жидкости (При $T=0$ это усреднение эквивалентно используемому Эдварсом). Поэтому рассматриваемая функция Грина представляет собой некоторое статистическое среднее и должна дать нам правильную плотность состояний электронов. Однако она бесполезна при решении вопроса о локализации электронов по Андерсону-Мотту /9, 10, 11/.

3. Одномерная Модель.

Мы рассмотрим сначала одномерную модель жидкости. При этом будем считать, что соответствующий структурный фактор имеет вид, изображенный на Рис.3, что является естественным аналогом Рис.2 в одномерном случае. Далее, мы предположим, что уровень Ферми свободных электронов проходит через точки вырождения их спектра, в которых образуются брэгговские разрывы в случае идеальной периодической структуры. (См.рис.4). Поэтому мы принимаем $2p_F = K$, где p_F - импульс Ферми свободных электронов. (Два электрона на атом, полностью заполненная зона Бриллюэна одномерного кристалла).

Из (2.13) имеем: (L - длина системы)

$$\begin{aligned} \sum (\epsilon_n p) &= \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |Kp+q| |V(p)|^2 S(q) \{i\epsilon_n - \xi_{p+q} - \sum (\epsilon_n p+q)\}^{-1} \\ &\approx A^2 \{i\epsilon_n - \xi_{p-K} - \sum (\epsilon_n p-K)\}^{-1} + A^2 \{i\epsilon_n - \xi_{p+K} - \sum (\epsilon_n p+K)\}^{-1} \end{aligned} \quad (3.1)$$

где

$$A^2 = \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |Kp+q| |V(p)|^2 S(q) \quad (3.2)$$

Мы воспользовались здесь характерной структурой $S(q)$ с двумя узкими пиками при $q = \pm K$. Нетрудно убедиться, что поправки на конечную ширину пиков малы, если выполнены условия: (см. Приложение II)

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{R_c} \ll |p - p_F| \\ \text{или} \\ v_F x &\ll 2\pi T \end{aligned} \quad (3.3)$$

где x - ширина пиков, R_c - радиус корреляций "ближнего" порядка, v_F - скорость Ферми свободных электронов.

Из рис.4 видны следующие свойства симметрии спектра свободных электронов в одномерном случае:

$$\begin{aligned} \xi_{p-K} &= -\xi_p && \text{при } p \sim +K/2 \\ \xi_{p+K} &= -\xi_p && \text{при } p \sim -K/2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

Тогда рассматривая электрон с $p \sim +K/2$ (рассмотрение $p \sim -K/2$ аналогично) мы можем учитывать только первое слагаемое в правой части (3.1), причем уравнение для собственно-энергетической части, фактически, представляет собой следующую систему двух уравнений:

$$\sum (\epsilon_n; \pm \xi_p) = A^2 G(\epsilon_n; \mp \xi_p) \quad (3.5)$$

так что одноэлектронная функция Грина определяется уравнениями:

$$\begin{aligned} i\epsilon_n - \xi_p - G^{-1}(\epsilon_n; \xi_p) &= A^2 G(\epsilon_n; -\xi_p) \\ i\epsilon_n + \xi_p - G^{-1}(\epsilon_n; -\xi_p) &= A^2 G(\epsilon_n; \xi_p) \end{aligned} \quad (3.6)$$

решение которых имеет вид:

$$G(\epsilon_n; \xi_p) = -\frac{i\epsilon_n + \xi_p}{2A^2} \left\{ \mp \sqrt{1 - \frac{4A^2}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2}} - 1 \right\} \quad (3.7)$$

Отметим, что аналогичное выражение для функции Грина было получено для другой задачи в работе [12]. Совершая обычным образом аналитическое продолжение к действительным частотам получаем для запаздывающей (опережающей) функции Грина:

$$G^{R,A}(\epsilon \xi_p) = -\frac{\epsilon + \xi_p}{2A^2} \left\{ \sqrt{1 - \frac{4A^2}{(\epsilon + i\delta)^2 - \xi_p^2}} - 1 \right\} \quad (3.8)$$

Плотность электронных состояний может быть вычислена по формуле:

$$N(\epsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \operatorname{Im} G^R(\epsilon \xi_p) \quad (3.9)$$

где N_0 - плотность состояний свободных электронов. Непосредственные вычисления дают:

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0} = \begin{cases} \frac{4}{\pi} \left(\frac{\epsilon}{2A}\right)^2 \left\{ E\left(\frac{2A}{\epsilon}\right) - K\left(\frac{2A}{\epsilon}\right) \right\} + \frac{4}{\pi} K\left(\frac{2A}{\epsilon}\right) \\ \frac{4}{\pi} \left| \frac{\epsilon}{2A} \right| E\left(\frac{\epsilon}{2A}\right) \text{ при } \left| \frac{\epsilon}{2A} \right| < 1 \text{ при } \left| \frac{\epsilon}{2A} \right| > 1 \end{cases} \quad (3.10)$$

где $K(x)$ и $E(x)$ - полные эллиптические интегралы I-го и 2-го рода. Графически плотность состояний показана на Рис.5(кривая I). Мы получили плотность состояний с "псевдощелью" типа предлагавшейся в многочисленных работах Мотта и других авторов для интерпретации свойств "жидких полупроводников". Из (3.10) имеем:

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0} \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{при } |\epsilon| \rightarrow \infty \\ \left| \frac{\epsilon}{A} \right| \rightarrow 0 & \text{при } |\epsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

Ширина "псевдощели" $/4A/$ по порядку величины равна ширине запрещенной зоны соответствующего кристалла. Подчеркнем, что функция Грина (3.8) не обладает особенностями полюсного типа в окрестности "поверхности Ферми" и в этом смысле не описывает спектр элементарных возбуждений в области энергий, соответствующих "псевдощели". Этот результат отвечает возникающему здесь сильному рассеянию. Первое из условия (3.3) указывает

на неприменимость полученных формул в непосредственной окрестности "поверхности Ферми" (уровня химпотенциала системы) $\epsilon \sim 0$. При $R_c \geq 20a$, где a - межатомное рассеяние, это ограничение распространяется на область $|\xi_p| \leq 0,05 \epsilon_F$ (ϵ_F - энергия Ферми свободных электронов), что при типичных $|A| \sim 0,1 \div 0,2 \epsilon_F$ составляет примерно $\frac{1}{4} \div \frac{1}{8}$ от ширины "псевдощели". Ситуация улучшается с ростом R_c , однако обращение плотности состояний в нуль посредине "псевдощели" вызывает сомнения. Вместе с тем, для "жидких полупроводников" типична оценка $T \sim |A|$, так что второе условие (3.3) скорее всего выполнено при $R_c \geq 10a$. Поэтому детальное описание плотности состояний вблизи середины "псевдощели", возможно, не очень существенно.

4. Трехмерный случай.

Обобщение полученных результатов на случай трехмерной системы сталкивается в определенных трудностях. В частности, если в формуле (2.13) мы воспользуемся обычным приближением локального псевдопотенциала, т.е. $\langle p+q | V | p \rangle$ заменим на V_q , то при интегрировании по полярному углу между векторами p и q возникает характерное логарифмическое выражение (уравнение) для собственно-энергетической части $/8, 13-15/$ существенно менее сингулярное в интересующей нас области энергий, чем (3.1), и приводящее лишь к слабым изменениям в плотности состояний в сравнении со случаем свободных электронов. В работе $/13/$ указывалось, что при определенных предположениях относительно высших корреляционных функций монов (в част-

ности четырехионной) возможно появление вкладов в электронную собственно-энергетическую часть, имеющих "одномерный" вид типа (3.1). Однако, эти предположения представляются слишком жесткими, тем более, что в настоящее время не существует теоретических или экспериментальных методов, которые позволяли бы найти четырехионный коррелятор в жидкости.

Мы покажем, что достаточно наложить только одно условие на ионный псевдопотенциал (существенно основанное на его нелокальности) чтобы получить и в трехмерном случае результат типа (3.1). Впервые на необходимость учета нелокального характера псевдопотенциала при расчетах электронной структуры жидких металлов было указано в работе /15/. Как уже отмечалось, величина $\langle p+q | V | p \rangle$ для нелокального псевдопотенциала зависит от взаимной ориентации векторов p и q . К сожалению подробные расчеты такой зависимости в литературе практически отсутствуют, однако из имеющихся работ следует, что в интересующей нас области $|q| \sim 2p_F$ псевдопотенциал, соответствующий рассеянию "почти назад" существенно больше, чем для рассеяния на меньшие углы /5, 15/. Типичная зависимость от угла рассеяния показана на Рис.6. Поэтому мы предположим, что для интересующих нас веществ имеется ярко выраженный пик псевдопотенциала в области углов рассеяния $\theta \sim \pi$. Картина рассеяния $p \rightarrow p+q$ (при $|q| \sim K$) показана на Рис.7. Тогда:

$$\sum (\epsilon_n p) = \Omega_0 \int_0^\infty dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d \cos \theta | \langle p+q | V | p \rangle |^2 S(q) \times \{ i\epsilon_n - \sum_{|p+q|} - \sum (\epsilon_n; |p+q|) \}^{-1} \approx \quad (4.1)$$

$\approx A^2 \{ i\epsilon_n - \sum_{|p|-|K|} - \sum (\epsilon_n; |p|-|K|) \}^{-1}$
и задача сводится к "одномерной". Здесь

$$A^2 = \Omega_0 \int_0^\infty dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d \cos \theta | \langle p+q | V | p \rangle |^2 S(q) \quad (4.2)$$

Мы предполагали выполненными условия (3.3), а интегрирование по $\cos \theta$ считается эффективно обрезанным в интервале

$$\text{или} \quad \begin{aligned} |\delta \theta_{\max}|^2 &\ll \left| \frac{p - p_F}{p_F} \right| \\ |\delta \theta_{\max}|^2 &\ll \frac{2\pi T}{\epsilon_F} \end{aligned} \quad (4.3)$$

вблизи $\theta \sim \pi$, что выделяет узкий конус соответствующий доминирующей роли рассеяния назад. (См. Приложение II). При $|p - p_F| \sim 0,05 p_F$ $|\delta \theta_{\max}| \ll 0,22$, так что рассеяние идет назад в конус с раствором $\delta \theta \ll 13^\circ$. Учет конечной температуры смягчает это условие. Рассеяние на другие углы (соответствующие однородному "фону" на Рис.6) приводит к появлению упоминавшихся выше слабых перенормировок плотности состояний и потому не учитывается.

Нетрудно видеть, что в трехмерном случае вместо (3.4) имеет место:

$$\sum_{|p|-|K|} = -\sum_{|p|} \quad \text{при} \quad |p| \sim K/2 \quad (4.4)$$

Дальнейшее рассмотрение совпадает с (3.5) - (3.10), все формулы остаются в силе и для трехмерной системы.

Вы считалось, что уровень Ферми (химпотенциал) $\mu_0 = \varepsilon_F = \frac{K^2}{4m}$, т.е. приходится как раз посредине "псевдощели". Легко видеть, что наше рассмотрение остается в силе при произвольном положении уровня Ферми $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$. Мы по-прежнему считаем, что начало отсчета энергии помещено в точке μ_0 и введем $\tilde{\varepsilon}_p = \frac{p^2}{2m} - \mu_0$ удовлетворяющую (3.4) или (4.4). Свободная функция Грина имеет вид $\{i\varepsilon_n + \mu - p^2/2m\}^{-1} = \{i\varepsilon_n + \mu_0 + \Delta\mu - p^2/2m\}^{-1} = \{i\varepsilon_n + \Delta\mu - \tilde{\varepsilon}_p\}^{-1}$, так, что выражение для функции Грина, учитывающей рассеяние, получаются из (3.7) простой заменой $i\varepsilon_n \rightarrow i\varepsilon_n + \Delta\mu$; $\tilde{\varepsilon}_p \rightarrow \tilde{\varepsilon}_p$.

5. Обобщенное рассмотрение одноэлектронной функции

Грина.

В Приложении II показано, что приближение Эдварса, использовавшееся выше, учитывает не все существенные диаграммы высших порядков теории возмущений. Ниже проводится рассмотрение учитывающее все такие диаграммы. При этом считается, что задача уже сведена к эффективно одномерной (в смысле условий (3.3) и (4.3)). Приближение Эдварса свободно от такого предположения и в нем условие (3.3) и (4.3) используются только при решении уравнений. Ниже эти условия используются с самого начала благодаря чему удается отсуммировать более широкий класс диаграмм. Нетрудно видеть, что в каждом порядке теории возмущений одинаковый вклад дают диаграммы с чередующейся последовательностью гриновских функций $G^0(\varepsilon, p)$ и $G^0(\varepsilon, p - K)$ (мы рассматриваем $p \sim K/2$) и чередующейся последовательностью вершин с входящими или вы-

ходящими линиями взаимодействия, передающими импульс $\pm K$ (см. рис. 8). Мы можем продуммировать все такие диаграммы методом предложенным Л.В.Келдышем. Общий член разложения такого типа имеет вид:

$$g_n(p) = \frac{A^{2n} n!}{(i\varepsilon_c - \tilde{\varepsilon}_p)^n (i\varepsilon_c + \tilde{\varepsilon}_p)^n (i\varepsilon_c - \tilde{\varepsilon}_p)} \quad (5.1)$$

где A^2 определяется (3.2) или (4.2), множитель $n!$ получается из простых комбинаторных соображений. В самом деле, имеется $2n$ точек, к которым прикрепляются ^{линии} взаимодействия. Из них n точек имеют выходящую линию, которая любым из $n!$ способов может войти в оставшиеся свободными n вершин, соответствующих входящим линиям. Используем тождество:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} e^{-z} (z z)^n dz = \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{1}{1 - z z} \quad (5.2)$$

Тогда одноэлектронная функция Грина есть:

$$G(\varepsilon, p) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(p) = \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{i\varepsilon_c + \tilde{\varepsilon}_p}{(i\varepsilon_c)^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - z A^2} \quad (5.3)$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned} \text{Im } G^{R,A}(\varepsilon, p) &= \mp \pi \int_0^{\infty} dz e^{-z} (\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_p) \delta(\varepsilon^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2 - z A^2) \\ &= \mp \frac{\pi}{A^2} (\varepsilon + \tilde{\varepsilon}_p) \theta(\varepsilon^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2) e^{-\frac{\varepsilon^2 - \tilde{\varepsilon}_p^2}{A^2}} \end{aligned} \quad (5.4)$$

и ^A плотность состояний (3.9) есть:

$$\begin{aligned} \frac{N(\varepsilon)}{N_0} &= 2 \left| \frac{\varepsilon}{A} \right| e^{-\frac{\varepsilon^2}{A^2}} \left\{ -i \frac{\sqrt{\pi}}{2} \Phi \left(i \frac{\varepsilon}{|A|} \right) \right\} \equiv \\ &\equiv 2 \left| \frac{\varepsilon}{A} \right| e^{-\frac{\varepsilon^2}{A^2}} \text{Erfi} \left(\frac{\varepsilon}{|A|} \right) \end{aligned} \quad (5.5)$$

где $\Phi(ix)$ - интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Графически плотность состояний (5.5) представлена кривой 2 на Рис.5.

Имеем асимптотики:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow \infty \\ 2 \frac{\varepsilon^2}{A^2} \rightarrow 0 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \quad (5.6)$$

Мы видим, что плотность состояний, соответствующая функции Грина (5.3) имеет качественно тот же характер, что и рассмотренная выше в приближении Эдвардса, Различие в асимптотике при $\varepsilon \rightarrow 0$ несущественно, т.к. уже отмечалось, что эта область либо вообще не описывается в наших приближениях, либо не представляет особого интереса в реальных условиях, когда $T \sim |A|$.

Для полноты приведем выражения для $Re G^{R,A}(\varepsilon_{\beta p})$ соответствующее (5.3):

$$Re G^{R,A}(\varepsilon_{\beta p}) = \begin{cases} \frac{\varepsilon + \beta p}{A^2} e^{-\frac{\varepsilon^2 - \beta^2 p^2}{A^2}} Ei\left(\frac{\varepsilon^2 - \beta^2 p^2}{A^2}\right) & \text{при } \varepsilon^2 - \beta^2 p^2 \geq 0 \\ \frac{\varepsilon + \beta p}{A^2} e^{-\frac{|\varepsilon^2 - \beta^2 p^2|}{A^2}} Ei\left(-\frac{|\varepsilon^2 - \beta^2 p^2|}{A^2}\right) & \text{при } \varepsilon^2 - \beta^2 p^2 < 0 \end{cases} \quad (5.7)$$

где $Ei(x)$, $\overline{Ei}(x)$ - интегральные показательные функции.

Нетрудно видеть, что эти выражения также не описывают какого-либо спектра элементарных возбуждений вблизи "поверхности Ферми".

В заключение автор выражает свою глубокую признательность Л.В.Келдышу за большую помощь в работе и многочислен-

ные обсуждения. Он также благодарен за обсуждение Е.Г.Максимова и Д.И.Хомскому.

Приложение I.

Ниже рассматривается конкретная модель динамического форм-фактора жидкости, находящейся вблизи точки кристаллизации, предложенная в работах /16/:

$$S(q\omega) = N \frac{\omega_0}{\pi} \frac{1}{\omega^2 + \Gamma_q^2} \quad (п. I.1)$$

где

$$\Gamma_q = \omega_0 \{C(T - T_c) + B(q - K)^2\} \quad (п. I.2)$$

T_c - точка абсолютной неустойчивости жидкости относительно кристаллизации, ω_0 - характерная частота ионных колебаний, C и B - некоторые константы. С помощью (2.14) находим структурный фактор:

$$S(q) = \frac{1}{B} \frac{1}{(q - K)^2 + \chi^2} \quad (п. I.3)$$

где

$$\chi \equiv \frac{1}{R_c} = \sqrt{\frac{C}{B}} \sqrt{T - T_c} \quad (п. I.4)$$

Используя (п. I.1) в (2.9) и (2.6) найдем:

$$F(q\omega_m) = \frac{\omega_0}{\Gamma_q} \frac{e^{-i\frac{\Gamma_q}{T}} - 1}{i\Gamma_q - i\omega_m} \approx \approx \frac{\omega_0}{T} \frac{1}{\omega_m - \Gamma_q} \quad (п. I.5)$$

где использовано $\Gamma_q/T \ll 1$, что справедливо вблизи точки фазового перехода /16/. Подставляя (п. I.5) в (2.11) и выполняя стандартным образом /6/ суммирование по частотам, проводя разложение по степеням $\Gamma_q/T \ll 1$ и оставляя только выраже-

вия сингулярные при $\Gamma_q \rightarrow 0$ (т.е. рассматривая окрестность точки кристаллизации (мы получим) для электронной собственно-энергетической части следующее выражение:

$$\sum (\epsilon_n p) \approx \frac{1}{N} \sum_q S(q) |\langle p+q | V | p \rangle|^2 G(i\epsilon_n - i\Gamma_q; p+q) \quad (\text{п.И.6.})$$

где $S(q)$ определяется (п.И.3). "Неупругое" рассеяние в (п.И.6.) определяется в рассматриваемой модели "мягкой" релаксационной модой, связанной с неустойчивостью жидкости относительно кристаллизации /16/, и им можно пренебречь ввиду $\Gamma_q \ll 2\pi T$, что сводит (п.И.6) к (2.13).

Приложение II.

Покажем, как можно оправдать приближение (3.1). Имеем для простейшего (несамосогласованного) вклада в электронную собственно-энергетическую часть: (одномерный случай)

$$\sum (\epsilon_n p) = \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} S(q) |\langle p+q | V | p \rangle|^2 \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - q} \quad (\text{п.П.1})$$

Если $S(q)$ имеет острые пики при $q = \pm K$, в (п.П.1) можно провести разложение в ряд Тейлора в окрестности

Например, для $q \sim -K$:

$$\begin{aligned} \sum (\epsilon_n p) &\approx \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - q} \\ &\times \left\{ 1 + v_F(q+K) \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - K} + \dots \right\} \approx \\ &\approx A^2 \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - K} \left\{ 1 + v_F \chi \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - K} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{п.П.2})$$

где χ - ширина рассматриваемого пика. Имеем

$$\left| v_F \chi \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - K} \right| = \left| \frac{v_F \chi}{i\epsilon_n + \frac{1}{2}p} \right| < \frac{v_F \chi}{\text{Max} \{ | \frac{1}{2}p |, 2\pi T \}} \text{ так что}$$

поправка от "размазанности" пика мала при условии:

$$v_F \chi \ll \text{Max} \{ | \frac{1}{2}p |, 2\pi T \} \quad (\text{п.П.3})$$

что совпадает с (3.3).

Может показаться, что используемое приближение эквивалентно введению (в одномерном случае) дальнего кристаллического порядка, (структурный фактор Дельта-функция). Однако, это не так; исходные уравнения для функции Грина (например, уравнения Эдварса) пишутся в предположении отсутствия дальнего порядка и макроскопически однородной жидкости. Присутствие дальнего порядка влечет появление "аномальных" функций Грина, описывающих процессы переброса, существенно меняющих структуру уравнений.

Условие (4.3) в трехмерном случае получается аналогично:

$$\begin{aligned} \sum (\epsilon_n p) &= \Omega_0 \int dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p + q} \\ &\approx \Omega_0 \int dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d\cos\theta |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - |q|} \times \\ &\times \left\{ 1 + v_F q (\cos\theta + 1) \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - |q|} + \dots \right\} \approx \\ &\approx A^2 \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - |K|} \left\{ 1 + v_F K \frac{|\delta\theta_{\text{max}}|^2}{2} \frac{1}{i\epsilon_n - \frac{1}{2}p - |K|} + \dots \right\} \end{aligned} \quad (\text{п.П.4})$$

где, естественно, предполагается выполненным условие типа (п.П.3) и $\cos\theta \sim -1$ соответственно доминирующей роли рассеяния "назад". Поправка, связанная с отклонением от рассеяния точно "назад" мала при

$$\frac{1}{2} v_F K |\delta\theta_{\text{max}}|^2 \ll \text{Max} \{ | \frac{1}{2}p |, 2\pi T \} \quad (\text{п.П.5})$$

что совпадает с (4.3).

Наконец рассмотрим роль неучтенных диаграмм. Поскольку псевдопотенциал считается слабым и задача сведена к "одномерной", в 4-м порядке теории возмущений имеются только диаграммы типа Рис.9. (Учитываются только парные ионные корреляции). В приближении Эдварса мы пренебрегали "перекрестными" диаграммами типа Рис.9(б), но учли все диаграммы типа Рис.9(а) ("одели" внутреннюю электронную линию). Рассмотрим $p \sim + K/2$ Тогда в диаграмме Рис.9(а) чередуются электронные линии с импульсами $p, p-K$, причем место ^{имеет} свойство симметрии (3.4). Напротив, в диаграмме Рис.9(б) возникает в место одной из линий с $p-K$ линия с $p+K$, но как видно из Рис.3 $|\frac{3p+K}{3p}| \geq |\frac{3p}{3p-K}| = |\frac{3p}{3p-K}|$ при $p \sim + K/2$. Поэтому "перекрестная" диаграмма 4-го порядка меньше "неперекрестной", по крайней мере, в отношении $|\frac{3p}{3p+K}| \leq Const \frac{|3p|}{2F}$ $|Const < 1|$ и ее вкладом можно пренебречь. Поэтому приближение Эдварса учитывает все существенные диаграммы до 4-го порядка включительно. Однако в более высоких порядках (начиная с 6-го) появляются "перекрестные" диаграммы, которые дают вклад того же порядка величины, что и соответствующие "неперекрестные" (См.Рис.10, где диаграмма(а) порядка диаграммы (б), диаграмме (в)- типичная существенная диаграмма 8-го порядка). Тем не менее, как мы видели при явных расчетах (5.3) - (5.5), вклад диаграмм высших порядков не приводит к существенным изменениям в картине плотности состояний.

Литература.

1. N.F.Mott, E.A.Davis. Electronic Processes in Non-Crystalline Materials. Oxford.1971. Н.Мотт. Электроны и Неупорядоченных Структурах. "Мир". 1969.
2. R.S.Allgaier. Phys. Rev. 185, 227 (1969); Phys.Rev. B2, 2257, (1970). Journ. Vac. Sci. Techn. 8, 113 (1971).
3. A.P.Регель и др. Proc. 10th Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors Cambridge. Massachusetts (1970).
4. В.А.Алексеев, А.А.Андреев, В.Я.Прохоренко, УФН 106, 393 (1972).
5. У.Харрисон. Псевдопотенциалы в Теории металлов. "Мир", 1968.
6. А.А.Абрикосов, А.П.Горьков, И.Е.Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. Физматгиз,1963.
7. Д.Пайнс, Ф.Нозьер. Теория квантовых жидкостей. "Мир",1967.
8. S.F.Edwards. Phil. Mag. 6, 617 (1961). Proc.Roy.Soc. A267, 518 (1962).
9. P.W.Anderson. Phys. Rev. 109, 1492 (1958) Comments Sol. St. Phys. 2, 193 (1970).
10. E.N.Economou, M.H.Cohen. Phys. Rev. B5, 2931 (1970).
11. M.H.Cohen. Journ. Non-Crystalline Solids 4,391(1970).
12. A.Schmid. Zs. Physik. 231, 324 (1970).
13. J.Ziman. J.Phys. G2, 1704 (1969).
14. L.Ballentine. Can. J.Phys.44, 2533 (1966).
15. R.Shaw, N.Smith. Phys.Rev. 178, No.3, 985 (1969).
16. T.Schneider et al.Phys. Rev. Lett. 25, 1423(1970).Phys. Rev. A3, 2145 (1971).

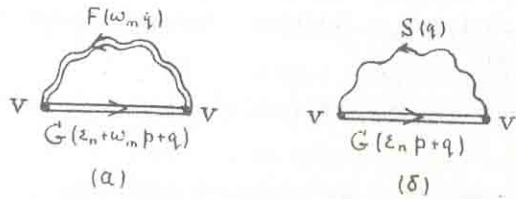


Рис. 1

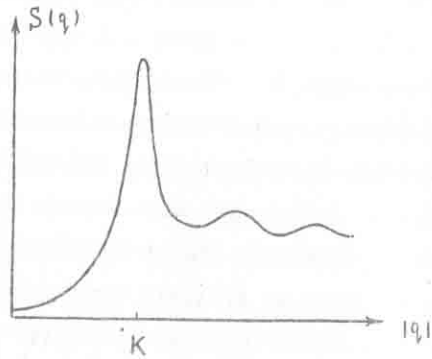


Рис. 2

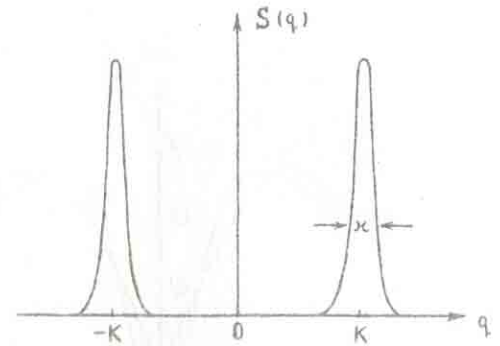


Рис. 3

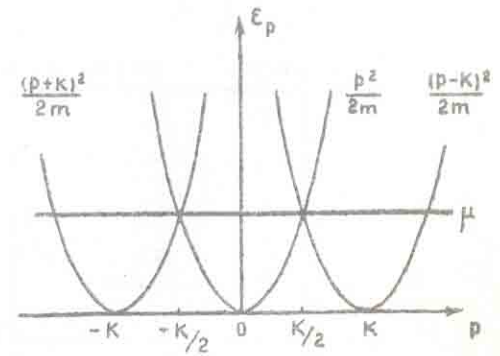


Рис. 4.

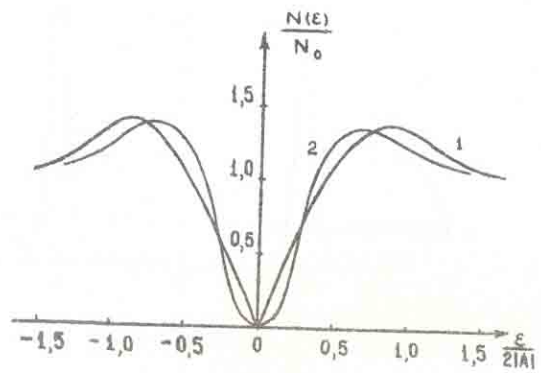


Рис. 5

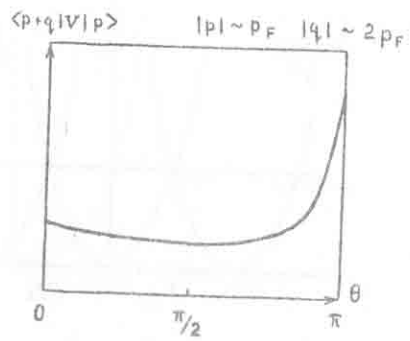


Рис. 6

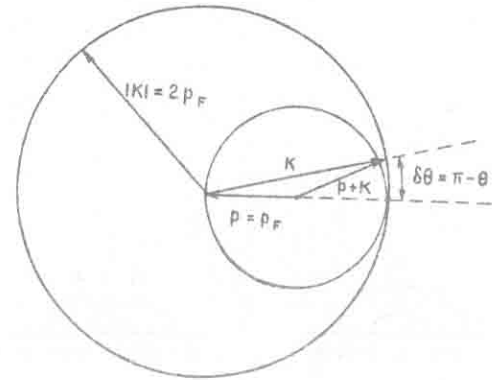


Рис. 7

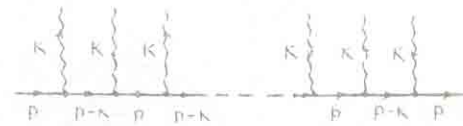


Рис. 8

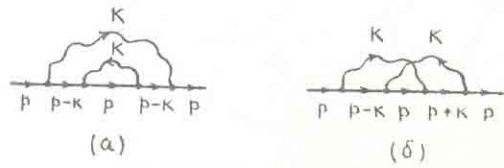


Рис. 9

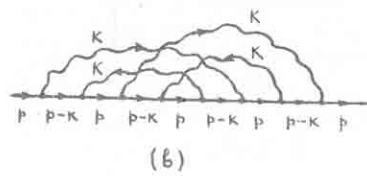
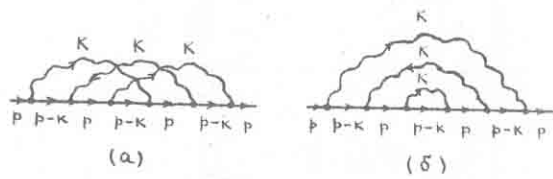


Рис. 10