

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОРДЕНА ЛЕНИНА ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. П.Н. ЛЕБЕДЕВА

Михаил Виссарионович САДОВСКИЙ

НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕОРИИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ
СИСТЕМ

01.04.02. - теоретическая и математическая физика

Диссертация, представленная
на соискание ученой степени
кандидата физико-математи-
ческих наук

Научный руководитель
член-корреспондент АН СССР
Леонид Вениаминович КЕЛДЫН

Москва, 1974

СО Д Е Р Ж А Н И Е

В В Е Д Е Н И Е	3
Г л а в а I. ЭЛЕКТРОНЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ. ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ ЖИДКИХ ПОЛУПРО- ВОДНИКОВ	4
§1. Экспериментальные исследования ...	4
§2. Теоретические модели	8
Г л а в а II. МОДЕЛЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ	20
§1. Общие соотношения для одноэлект- ронной функции Грина	20
§2. Одномерная модель	25
§3. Трехмерная модель	36
§4. Диэлектрические и высокочастотные свойства	39
§5. Переход полупроводник - металл ...	49
Г л а в а III. КВАЗИОДНОМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ, ИСПЫТЫВАЮЩИЕ ПАЙЕРЛСОВСКИЙ СТРУКТУРНЫЙ ПЕРЕХОД. ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ	58
§1. Экспериментальные исследования ...	59
§2. Теоретические модели	65
Г л а в а IV. ВЛИЯНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТИ КРИСТАЛЛИ- ЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ НА ПАЙЕРЛСОВСКИЙ ПЕРЕ- ХОД	76
§1. Общие замечания	76
§2. Модель Ллойда	77
§3. Модель "кусочков"	82
§4. Обсуждение	85
Г л а в а V. ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ПРИ ПАЙЕРЛСОВСКОМ ПЕРЕХОДЕ ..	90
§1. Энергетический спектр	90
§2. Диэлектрические и высокочастотные свойства	102
З А К Л Ю Ч Е Н И Е. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ ..	109

В В Е Д Е Н И Е

Исследования электронных свойств неупорядоченных систем привлекают в настоящее время внимание большого числа экспериментаторов и теоретиков. Интерес этот стимулируется как большими трудностями описания явлений в неупорядоченных системах, так и возможными технологическими приложениями в таких областях как электроника и энергетика. Достигнутый сейчас прогресс выражается, во-первых, в большом количестве экспериментального материала, а во-вторых, в построении определенных теоретических моделей качественного характера, объясняющих наблюдаемые явления. Вместе с тем последовательная теория электронов в неупорядоченных структурах в настоящее время практически отсутствует.

Настоящая диссертация посвящена теоретическому рассмотрению электронных свойств двух классов неупорядоченных систем - расплавов полупроводников (так называемых жидких полупроводников) и квазиодномерных систем, испытывающих пайерлсовский структурный переход. Эти системы вызывают сейчас особенно большой интерес и, как оказывается, удастся предложить ряд теоретических моделей, позволяющих описать некоторые их характерные черты с единой точки зрения, основанной на ряде аналогий в структуре их энергетического спектра.

Г л а в а I

ЭЛЕКТРОНЫ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ. ЭКСПЕРИМЕНТ
И ТЕОРИЯ ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В этой главе будут кратко рассмотрены основные экспериментальные факты, относящиеся к одному из наиболее интересных классов неупорядоченных систем, так называемым жидким полупроводникам, а также будет сделан краткий обзор теоретических представлений, используемых в литературе, для интерпретации их свойств. Для более подробного знакомства с экспериментами, также как и с вопросами теории, можно обратиться к монографиям [1-3], а также к обзорам [4-7], где приводится исчерпывающая библиография.

§I. Экспериментальные исследования.

Изучение электронных свойств расплавов твердых тел интересно по нескольким причинам. Во-первых, понимание роли структурного разупорядочения в формировании энергетического спектра и кинетических свойств конденсированных тел, также как и изучение свойств вещества в широких интервалах внешних параметров (таких как температура и давление) имеет большое общезначение; во-вторых, имеются реальные практические запросы, связанные с использованием жидких полупроводников в качестве высокотемпературных теплоносителей в атомных энергетических установках, в качестве рабочего тела МГД-преобразователей энергии, термометров сопротивления, устойчивых к высокому уровню радиации в атомных реакторах и т.д. Следует отметить, что эффект "переключения", обусловивший огромный интерес к исследованию аморфных халькогенидных полупроводников [8, 9], недав-

но открыт в ряде жидких полупроводников [10, 11].

По своим электронным свойствам расплавы могут быть грубо разделены на три большие группы [12, 13].

Группа А (жидкие металлы). В эту группу входят расплавы подавляющего большинства обычных металлов (в том числе и переходных), а также расплавы целого ряда типичных полупроводников, таких, например, как Ge , Si , $InSb$ и других $A_{III}B_{V}$, теряющих при плавлении свои полупроводниковые свойства и переходящих в металлическое состояние. Для этих расплавов характерна падающая с ростом температуры электропроводность. Вблизи температуры плавления $\sigma > 5 \cdot 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ Константа Холла оказывается практически независимой от температуры и отрицательной $R < 0$; $|R| \approx |R_0|$, где R_0 - константа Холла, рассчитанная в модели свободных электронов, т.е. $R_0 = (nec)^{-1}$, где n - число свободных электронов в единице объема, вычисленное в предположении полной ионизации электронов валентной оболочки атома (e - заряд электрона, c - скорость света). Для интерпретации свойств этих расплавов хорошо применимо приближение почти свободных электронов. Кинетические свойства обычно рассматриваются в рамках теории Займана [1-4, 6]. Отметим, впрочем, что исследование жидких переходных металлов начато сравнительно недавно и для интерпретации их свойств нужны довольно существенные модификации теории почти свободных электронов, вызванные наличием неполностью заполненных d - или f -оболочек атомов переходных элементов [14, 15].

Группа В ("квазиметаллические" расплавы, "жидкие полупроводники"). Эту 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 (испытывая в точке плавления небольшой скачок), т.е. возрастает с ростом температуры. При этом типичные значения σ лежат в интервале $0,5 \cdot 10^2 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1} \leq \sigma \leq 2 \cdot 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. В ранних работах [16] эти вещества обычно классифицировались как жидкие полупроводники. Между тем дальнейшие исследования, главным образом по эффекту Холла, показали, что ситуация не так проста. Выяснилось [4, 12], что по эффекту Холла эти вещества проявляют скорее металлические свойства: константа Холла при плавлении испытывает сильный скачок и далее почти не зависит от температуры, знак ее всегда соответствует проводимости n -типа, а по абсолютной величине (по крайней мере для хорошо проводящих расплавов этой группы) она не слишком отличается от значения, получающегося в модели почти свободных электронов, превышая его в несколько раз для худших проводников этой группы. Вместе с тем знак термоэдс этих расплавов, как правило, свидетельствует о проводимости p -типа. Несоответствие знаков заряда носителей, получаемых из холловских измерений и термоэдс принято называть n - p аномалией [12]. Изложенные факты выделяют эту группу расплавов как промежуточную по свойствам между типичными металлами и полупроводниками. Их свойства могут быть, по-видимому, поняты в рамках приближения почти свободных электронов с учетом сильного рассеяния в области энергий, совпадающей с запрещенной зоной соответствующего кристалла и обусловленного либо

сохраняющимся близким порядком того же типа, либо определенными особенностями псевдопотенциала этих систем. Проводимость этих расплавов носит, вероятно, зонный характер и определяется вкладом электронов вблизи сильно размытой рассеянием поверхности Ферми или термическим возбуждением носителей через своего рода "запрещенную зону" (псевдощель) в "зону проводимости" (см. ниже). Дальнейшее рассмотрение (Глава II) будет посвящено, главным образом, построению аналога зонной структуры электронного спектра именно для веществ из группы В, т.е. для "жидких полупроводников".

Группа С. В эту группу входят расплавы плохо проводящих веществ типа GeS , SnS , Se , а также расплавы различных халькогенидных стекол. Проводимость веществ этой группы $\sigma < 10 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. Как правило наблюдается рост σ с температурой, что свидетельствует о термически активированном переносе. Знак константы Холла обычно отрицательный, что характерно для стеклообразных полупроводников. Вероятно плохо проводящие вещества этой группы обладают прыжковым механизмом проводимости по "зонам" локализованных состояний, которые следует, по-видимому, рассматривать в приближении "сильной связи" электронов с ионами. В дальнейшем эта группа расплавов не будет рассматриваться.

Следует подчеркнуть, что рассмотренное выше деление на три группы довольно условно и границы между ними не слишком определены. Мы опустили целый ряд деталей и подчеркнули только самые характерные черты. Можно проводить и иное деление, например, внутри группы В можно довольно четко разделить "металлоподобные расплавы" типа $PbTe$, Bi_2Te_3 и т.д. с $\sigma > 2 - 3 \cdot 10^2 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ и жидкие полупроводники с $\sigma < 2 - 3 \cdot 10^2 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$

[4, 13]. На границе групп В и С обнаружен ряд веществ, которые могут рассматриваться как "истинные" жидкие полупроводники (Sb_2Se_3 , $GeSe$), в которых эффект Холла оказывается чувствительным к действию примесей и может иметь положительный знак при допировании металлоидным компонентом [13], принимая значения, характерные для типичных кристаллических полупроводников.

Отметим недавно начатые и имеющие большое значение для понимания механизма электронной кинетики в расплавах экспериментальные исследования по переходу полупроводник-металл в расплавах в широком интервале температур выше точки плавления (система $Se-Te$) [17]. Было показано, что при достаточно высоких температурах (порядка 1000-1500°K) имеет место резкое ослабление свойственной полупроводнику экспоненциальной температурной зависимости электропроводности и переход к металлической проводимости.

Важное значение имеют также исследования "жидких полупроводников" ЯМР методом [18], дающие прямое подтверждение существующих качественных схем их энергетического спектра (существование "псевдощели", локализация электронов в псевдощели).

§2. Теоретические модели.

С теоретической точки зрения принципиальным является вопрос о том, как вообще в неупорядоченной системе типа жидкости может быть получен какой-либо аналог зонного спектра кристаллического твердого тела, который позволил бы классифицировать жидкости на металлические и полупроводниковые. Хорошо известно [19], что традиционные представления зонной теории связаны с периодической структурой кристаллов и вытекающей из нее теоремой Блоха. Кроме того, успехи современной теории твердого тела во многом

связаны с возможностью сведения реальной многочастичной задачи к рассмотрению системы как газа (жидкости) относительно слабо взаимодействующих квазичастиц, т.е. к задаче одно- или двухчастичной [20, 21]. В теории неупорядоченных систем [1, 5-7], вообще говоря, отсутствуют упрощения, связанные с симметрией решетки, а также как правило нельзя ввести в рассмотрение слабо-затухающие квазичастицы. В значительной мере при этом теряется представление об электронном спектре на языке соотношения энергии - квазиимпульс, и описание следует вести с помощью понятий, обобщающих элементарные представления теории твердого тела. Физически наблюдаемые величины должны рассматриваться как статистические средние по ансамблям, описывающим распределения атомов в неупорядоченной системе или распределения случайных потенциальных полей, создаваемых этими атомами. Основной характеристикой энергетического спектра электронов в неупорядоченной системе оказывается, в частности, усредненная одноэлектронная плотность состояний [1, 6-7], которая может быть строго определена для произвольной многочастичной системы [7]. Существенную роль в формировании основных представлений теории неупорядоченных систем сыграли многочисленные работы, посвященные теории электронов в неидеальных кристаллах: сплавах, сильно легированных полупроводниках и т.п. [22, 23], где, в частности, возникла концепция "хвостов" плотности состояний в запрещенной зоне нашедшая применение и в теории аморфных и жидких систем [24]. Современный подход к теории электронов в неупорядоченных системах, сформулированный, главным образом, в работах Мотта [1, 6], возник как естественное обобщение упомянутых попыток описания неидеальных кристаллов.

В настоящее время существует общепринятая качественная модель электронного спектра аморфных и жидких полупроводников, получившая в литературе название модели Мотта-Коэна-Фрицше-Овшинского [1, 6, 25].

Влияние неупорядоченности на плотность электронных состояний в отдельной зоне, согласно этой модели, изображена на рис. I. По мере роста степени неупорядоченности (амплитуды случайного поля) в системе, по отношению к ширине исходной зоны на границах зоны растут "хвосты" плотности состояний (т.е. зона расширяется). При этом состояния электронов в "хвостах" оказываются локализованными (т.е. электроны с соответствующими энергиями не могут свободно распространяться в "решетке") флуктуациями случайного поля. Существуют критические энергии E_c и E_c' (пороги локализации, пороги подвижности), отделяющие области локализованных и делокализованных состояний. С ростом амплитуды случайного поля области локализованных состояний растут и при некоторой критической степени неупорядоченности могут локализоваться все состояния в зоне. Математически строгое обоснование такой схемы электронного спектра было дано для одной специфической модели в известной работе Андерсона [26], послужившей основой современной теории неупорядоченных систем. Современное состояние вопроса о локализации электронов в теории неупорядоченных систем рассмотрено в работах [27-32], где обсуждается также ряд тонких моментов статистического анализа. Отталкиваясь от модели влияния неупорядоченности на электронный спектр в одной зоне, нетрудно представить возможные варианты преобразования двухзонного спектра [1, 6, 25], которые, собственно, и используются при интерпретации свойств жидких метал-

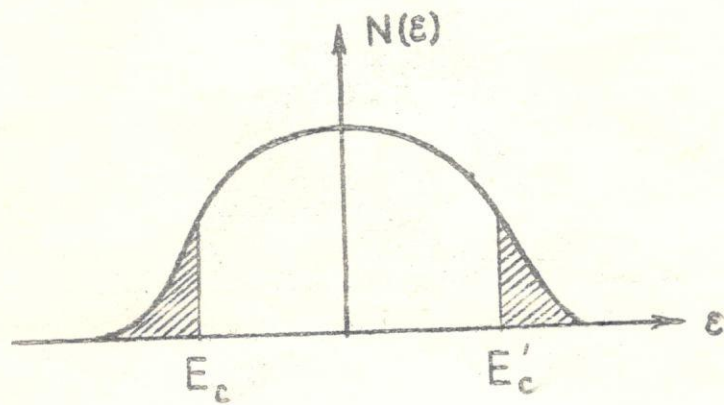
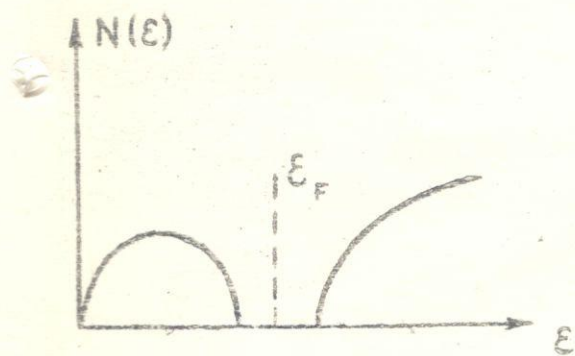


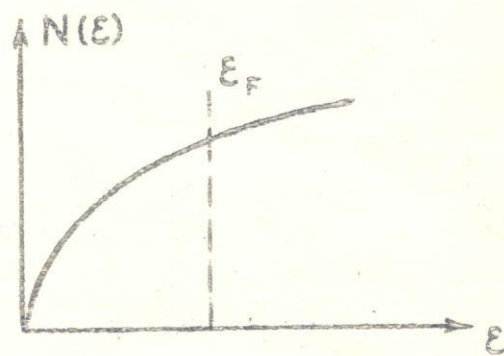
Рис. I. Плотность электронных состояний в однозонной модели Мотта-Козна-Фрицше-Овшинского. Заштрихованы области локализованных состояний.

лов и полупроводников. На рис. 2 представлены возможные варианты плотности электронных состояний, соответствующие различным степеням нарушения неупорядоченности (ближнего порядка) и степени связи электронов с полем атомной структуры. Мы видим, что запрещенная зона (область энергий, где плотность состояний обращается в нуль), вообще говоря, исчезает, однако в плотности состояний может остаться ее "отзвук" в виде довольно резкого провала, именуемого в теории псевдощелью [1, 6, 25]. При этом в области энергий, соответствующих псевдощели, может произойти локализация электронов, что существеннейшим образом скажется на электронной кинетике: ввиду малого вклада локализованных состояний в подвижность область локализованных состояний может имитировать запрещенную зону в смысле ее влияния на электропроводность (щель по подвижности) [1, 6, 25]. Имеются простые оценки, связывающие глубину псевдощели с порогом локализации по Андерсону [1, 6, 33].

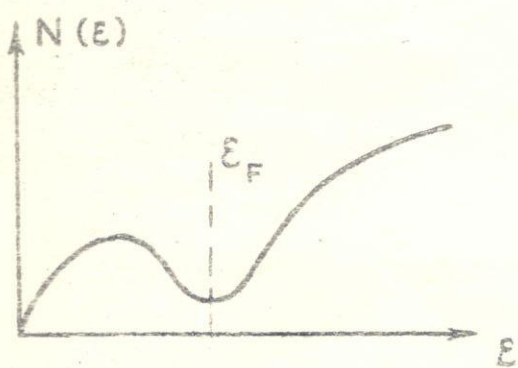
Изложенная схема энергетического спектра неупорядоченных систем в применении к "жидким полупроводникам" находит ^япрямое экспериментальное подтверждение в ЯМР экспериментах [18]. При этом проводились измерения сдвига Найта и времени спин-решеточной релаксации. Главный вклад в сдвиг Найта (происходящий от S-электронов проводимости) пропорционален плотности электронных состояний на уровне Ферми. Поэтому отношение плотностей состояний на уровне Ферми для жидкого полупроводника к соответствующему значению в модели свободных электронов, $g = \frac{N(\epsilon_F)}{N_0(\epsilon_F)}$, может быть определено путем измерений сдвига Найта для определенного ядра в жидком полупроводнике и последующего сравнения



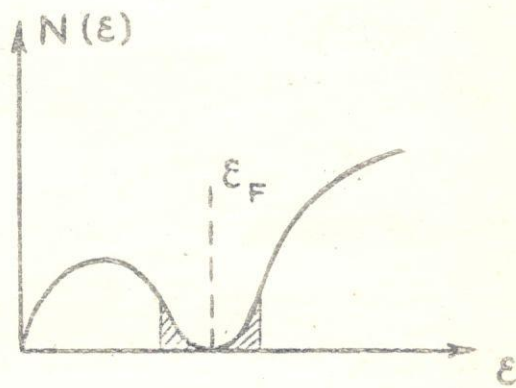
(а)



(б)



(в)



(г)

Рис. 2. Плотность состояний в двухзонной модели

неупорядоченной системы:

а. идеальный кристалл

б. жидкий металл

в. "металлоподобный" жидкий полупроводник

г. "жидкий полупроводник" - заштрихованы

области локализованных состояний

ϵ_F - положение уровня Ферми.

со сдвигом для того же ядра, но в металле с числом свободных электронов на атом, соответствующем рассматриваемому полупроводнику. Время спин-решеточной релаксации определяется, главным образом, взаимодействием ядерных спинов с электронами проводимости и пропорционально характерному времени взаимодействия, порядка времени, проводимого электроном у ядра. Снова сравнивая соответствующие измерения для "жидких полупроводников" и металлов можно определить параметр $\eta = \frac{\tau_e}{\tau_e^0}$, где τ_e - время, проводимое электроном у данного ядра в полупроводнике, τ_e^0 - соответствующее время в металле, который играет роль степени локализации электронов проводимости на уровне Ферми в "жидком полупроводнике".

Результаты измерений Уоррена [18] для In_2Te_3 приведены в Таблице I (температура плавления $950^\circ K$).

Т а б л и ц а I

$T(^{\circ}K)$	ρ	η
950	0.12	100
1025	0.21	17
1100	0.31	6
1250	0.41	2.9
1400	0.46	2.0

Эти данные довольно убедительно свидетельствуют о существовании в жидком In_2Te_3 ярко выраженной псевдощели и на определенную тенденцию к локализации электронов на уровне Ферми.

Аналогичные результаты получены и для ряда других "жидких полупроводников" [18], что качественно подтверждает существующие

представления о "зонной" структуре электронного спектра жидкостей.

Вместе с тем выше уже отмечалось, что эти качественные представления возникли, в основном, из рассмотрения "испорченных" кристаллов, когда зонная структура спектра закладывается в теорию изначально (периодичность исходного кристалла), а затем только "размывается" случайным полем (структурным беспорядком), что приводит к схемам типа рис.1 и рис.2. Такой подход вряд ли имеет смысл по отношению к неупорядоченным системам типа жидкостей и аморфных тел. Поэтому задача построения моделей, приводящих к аналогам зонного спектра в жидкостях представляется весьма актуальной. Отдельные попытки в этом направлении предпринимались и ранее. Еще Иоффе и Регель [16] высказали важные соображения в пользу того, что определяющую роль в формировании спектра систем типа жидких полупроводников может играть не дальний, а ближний порядок в расположении атомов. Первые попытки построения аналитических моделей принадлежат Губанову [24]. В одномерных моделях неупорядоченных систем удалось доказать ряд теорем относительно существования запрещенных зон и локализации электронов [34, 35], а также путем численных расчетов получить соответствующие кривые для плотности состояний.

В последнее время появились схемы, допускающие последовательное рассмотрение трехмерных систем [36-41]. В работах [36-37] вводится модельный гамильтониан, описывающий неупорядоченную систему типа аморфного германия или кремния, причем электроны рассматриваются как локализованные на атомах и ковалентных связях. Два энергетических параметра гамильтониана описывают переходы электрона с атома на атом и со связи на связь. Без предло-^{по}

жений о наличии дальнего порядка в расположении атомов удается строго доказать, что при определенных соотношениях между параметрами (и в отсутствие разорванных связей) в системе сохраняется зонный спектр с истинной запрещенной зоной, разделяющей зоны, происходящие от состояний электронов связывающего и анти-связывающего типов. По-видимому, флуктуации параметров, также как наличие разорванных связей могут привести к образованию псевдощели. Обсуждаемая модель соответствует использованию приближения сильной связи теории твердого тела, когда зоны возникают из-за незначительного перекрытия волновых функций электронов соседних атомов и происходят от отдельных атомных уровней. Довольно очевидно, что в соответствии с идеями работы [16] спектр определяется^е исключительно ближним порядком, в данном случае задаваемом системой насыщенных ковалентных связей. По-видимому, модель [36-37] пригодна для рассмотрения аморфных стекол и, вероятно, некоторых жидкостей группы С с очень малой электронной подвижностью.

В работах [38-41] путем машинных расчетов показывается, что картина плотности состояний в аморфных структурах германия и кремния определяется рассеянием электронов на сравнительно небольших "кластерах", содержащих порядка десяти атомов, причем она оказывается не очень чувствительной к предположениям о распределении самих кластеров, но чувствительна к атомным конфигурациям внутри кластеров. Система представляется, таким образом, как суперпозиция "кластеров" нескольких типов, в каждом из которых задается определенная конфигурация атомов, определяющая ближний порядок. Рассчитанная плотность состояний обладает типичной псевдощелью в области энергий, соответствующей запрещен

ной зоне кристалла и, по-видимому, может быть сопоставлена имеющимся экспериментальным данным для аморфного германия и кремния. Метод расчета плотности состояний, предложенный в работах [38-41], может вероятно использоваться для реалистических расчетов спектра электронов в аморфных структурах с использованием эмпирических или модельных псевдопотенциалов и моделированием различных типов ближнего порядка.

К сожалению, до настоящего времени отсутствует убедительная теоретическая схема описания "квазиметаллических" и "полупроводниковых" жидкостей, относящихся к группе В. Как уже отмечалось, она, по-видимому, должна исходить из обобщения модели почти свободных электронов теории жидких металлов, учитывающей определяющую роль рассеяния электронов на слабом псевдопотенциале ионов, коррелированным образом распределенных в жидкости. Это становится ясным, если учесть близость (по ряду свойств, таких как эффект Холла) этих расплавов к жидким металлам [12, 13], также как успешное применение методов теории псевдопотенциала [42] к расчету спектров электронов для большинства типичных представителей этой группы в кристаллическом состоянии.

Попытка учета сильных корреляций в ионной подсистеме и их влияния на спектр электронов жидкого металла (полупроводника) в области энергий, соответствующей запрещенной зоне кристалла, были предприняты в известных работах Эдвардса [43-45]. Однако ему не удалось получить определенных и законченных результатов, хотя некоторые качественные возможности были проиллюстрированы. Последующие расчеты по методу Эдвардса с использованием реальных структурных факторов жидкости и модельных псевдопотенциалов привели (для металлов) к картине плотности состояний, очень близкой к

таковой в модели свободных электронов [46-48].

В важной работе Займана [49] рассматривались условия, при которых приближения типа Эдвардса могли бы привести к появлению зонной структуры в электронном спектре жидкости за счет жестких корреляций ближнего порядка. При этом, однако, не была сформулирована какая-либо четкая модель, которая привела бы к желаемому результату.

Глава II настоящей диссертации посвящена формулировке модели электронного спектра жидкостей, являющейся определенным обобщением подхода Эдвардса и позволяющей получить все основные результаты в аналитическом виде [50-52]. При соблюдении некоторых требований модельного характера удастся получить плотность электронных состояний с ярко выраженной псевдощелью в области энергий, соответствующей запрещенной зоне кристалла, а также рассмотреть диэлектрические и оптические свойства, оказывающиеся промежуточными между типичными металлами и полупроводниками.

Наряду с задачей об энергетическом спектре электронов принципиальную проблему теории неупорядоченных систем составляет описание электронной кинетики. Трудности последовательного описания здесь связаны с уже упоминавшейся невозможностью введения здесь концепции хорошо определенных квазичастиц и, соответственно, использования формализма кинетических уравнений. Теория должна строиться на основе общей теории линейной реакции, например, на основе формализма Кубо [53]. В настоящее время имеется только ряд грубых качественных схем, позволяющих интерпретировать экспериментальные факты [1, 4, 6-7, 12, 14, 25, 54-61]. При этом выделяется по крайней мере пять различных режимов проводимости, соответственно разной степени связи элект-

ронов со случайным полем ионов.

1) Металлический режим (жидкие металлы). Длина свободного пробега ℓ превышает среднее межатомное расстояние a . Применима теория электропроводности Займана [1-4]. Электропроводность $\sigma \geq 2 \cdot 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$.

2) Диффузионный (броуновский) режим (металлоподобные "жидкие полупроводники"). Длина свободного пробега $\ell \leq a$ и имеет смысл "длины когерентности фаз" волновой функции [25, 54]. Электропроводность σ лежит в интервале $10^2 - 2 \cdot 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. Применимо описание проводимости и Холл-эффекта в модели "хаотических фаз" [54] или обобщений модели свободных электронов [55, 56]. При этом система считается пространственно однородной на микроскопических расстояниях.

3) "Перколяционный режим" ("жидкие полупроводники", жидкие металлы в критической и за критической областях). До известной степени этот режим является альтернативным к диффузионному и претендует на описание того же класса веществ. Считается, что в неупорядоченной системе существуют микроскопические неоднородности, возникающие из-за формирования "кластеров" ближнего порядка. Энергетическая щель (псевдощель) в спектре существует локально и система представляется в виде ансамбля "металлических" и "полупроводниковых" областей. Описание кинетики можно вести на языке классической теории "протекания" (percolation) [57-59] и теории "эффективной среды" [58, 59]. Некоторые представления, связанные с этим режимом проводимости подвергались критике [60], но правомерность соответствующей интерпретации для описания целого ряда систем не вызывает сомнения [59, 60]. В главе II мы покажем, что предлагаемая в диссертации модель

энергетического спектра систем типа "жидких полупроводников" может служить микроскопической основой для описания кинетики на языке теории "протекания" [52].

4) Полупроводниковый режим (жидкие полупроводники). Плотность состояний на уровне Ферми очень мала, т.е. существует ярко выраженная псевдощель (щель по подвижности). Электропроводность определяется термической активацией электронов через псевдощель (щель по подвижности) [13, 25]. По-видимому, в этом режиме находятся "истинные" жидкие полупроводники [13] с $\sigma \sim 10^2 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$, эффект Холла в которых чувствителен к допированию.

5) Прищковый режим (жидкости группы С, аморфные стекла). В этом случае все состояния в широком интервале энергий вокруг уровня Ферми являются локализованными по Андерсону, так что проводимость носит прищковый характер [1, 6, 7, 61] $\sigma < 10^{-1} \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$.

Обилие качественных схем и отсутствие последовательного теоретического рассмотрения не позволяет сейчас утверждать, что во всех случаях имеется хотя бы качественно правильное понимание электронной кинетики в неупорядоченных системах. Это делает актуальной задачу построения аналитических моделей электронных свойств неупорядоченных систем, которые допускали бы последовательную (с теоретической точки зрения) трактовку.

В заключение этого краткого обзора литературы по электронной теории неупорядоченных систем подчеркнем, что здесь отмечены только основные работы (часто обобщающего или обзорного характера), в которых формулируются представления, широко используемые в современной литературе. Недостаток места не позволяет провести

сколько-нибудь полный критический обзор. Более подробное рассмотрение можно найти в обзоре автора [62], также как в уже неоднократно цитировавшихся обзорах и монографиях [1-7].

Г л а в а П

МОДЕЛЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА "ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ"
[50-52]§I. Общие соотношения для одноэлектронной функции Грина.

Гамильтониан взаимодействия электрона с ионами жидкости запишем в виде:

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

где

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

- Фурье-компонента плотности ионов (R_i - положения ионов, зависящие, вообще говоря, от времени; N - полное число ионов), $\langle p+q|V|p \rangle$ - матричный элемент ионного псевдопотенциала, в общем случае нелокального [42]; a_p^+ и a_p - электронные операторы вторичного квантования.

При рассмотрении задачи об электронном спектре будем вычислять одноэлектронную функцию Грина в температурной технике Мацубары [21]:

$$G(p\tau) = - \langle T_\tau a_p(\tau) a_p^+(0) \rangle \quad (2.3)$$

где τ - термодинамическое мнимое время, а усреднение ведется по ансамблю Гиббса жидкости. Будем считать, что динамика ионной подсистемы задана и описывается функцией Грина:

$$F(q\tau) = - \langle T_\tau \rho_q(\tau) \rho_q^+(0) \rangle \quad (2.4)$$

Для Фурье-образа имеем обычное спектральное представление [21]:

$$F(q\omega_m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(q\omega')}{i\omega_m - \omega'} \quad (2.5)$$

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

$$A(q\omega) = Z^{-1} \sum_{mn} \exp\left\{-\frac{E_n}{T}\right\} |(P_q)_{mn}|^2 \times \quad (2.6)$$

$$\times \left\{1 - \exp\left(-\frac{\omega_{mn}}{T}\right)\right\} \delta(\omega - \omega_{mn})$$

$$\omega_{mn} = E_m - E_n; (P_q)_{mn} = \langle m | P_q | n \rangle; Z = \sum_m \exp\left\{-\frac{E_m}{T}\right\}$$

Индексы m, n нумеруют состояния ионной подсистемы. Введем теперь динамический форм-фактор жидкости согласно [63]:

$$S(q\omega) = Z^{-1} \sum_{mn} |(P_q)_{mn}|^2 \exp\left\{-\frac{E_n}{T}\right\} \delta(\omega - \omega_{mn}) \quad (2.7)$$

Сравнивая (2.6) и (2.7), видим, что

$$A(q\omega) = S(q\omega) \left\{1 - e^{-\frac{\omega}{T}}\right\} \quad (2.8)$$

Взаимодействие (2.1) естественным образом порождает диаграммную технику, аналогичную технике для электрон-фононного взаимодействия [21]. Простейший вклад в электронную собственно-энергетическую часть изображен на рис.3(а) и имеет вид:

$$\sum (\epsilon_n p) = \frac{T}{N^2} \sum_q |\langle p+q | V | p \rangle|^2 \sum_m F(q\omega_m) \times \quad (2.9)$$

$$\times \left\{i\epsilon_n + i\omega_m - \xi_{p+q}\right\}^{-1}$$

$$\epsilon_n = (2n+1)\pi T; \xi_p = p^2/2m - \mu.$$

μ - химический потенциал электронов (уровень Ферми).

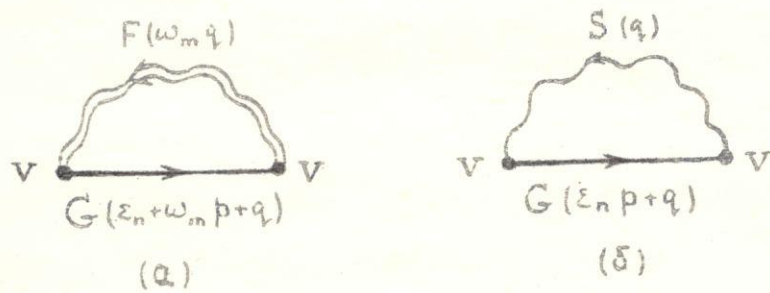


Рис.3. Простейшая собственно-энергетическая часть
 электрон-ионного взаимодействия:
 а. динамическое приближение /2.9/
 б. статическое приближение /2.12/.

Теперь заметим, что характерные энергии ионных возбуждений, т.е. частоты, на которых эффективно отличен от нуля динамический форм-фактор $S(q\omega)$, удовлетворяют в жидкости условие $\omega \ll T$. В самом деле, частоты колебаний ионов в жидкости не превышают дебаевской частоты фононов в соответствующем твердом теле, тогда как температура, естественно, превышает температуру плавления. В то же время электронный спектр интересует нас в интервале энергий больше или порядка T в окрестности уровня Ферми, так как именно эта область дает существенный вклад в электронные свойства. Поэтому в первом приближении можно пренебречь влиянием динамики ионной подсистемы и учесть в (2.7) только члены с $m = n$:

$$\frac{1}{N} S(q\omega) \cong S(q) \delta(\omega) \quad (2.10)$$

$$S(q) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(q\omega) \quad (2.11)$$

Здесь $S(q)$ - статический структурный фактор жидкости [63]. Используя (2.5)-(2.8), (2.10) в (2.9), получаем:

$$\sum (\epsilon_n p) \cong \frac{1}{N} \sum_q |K_{p+q}|^2 S(q) \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_{p+q}} \quad (2.12)$$

- статическое приближение (рис.3(б)), применявшееся Эдвардсом в работах [43, 44]. При этом использовавшееся в этих работах усреднение по всевозможным ионным конфигурациям неявно содержится в определениях (2.6), (2.7), где производится усреднение по каноническому ансамблю жидкости.

Статический структурный фактор $S(q)$ определяется экспериментально из данных по упругому рассеянию рентгеновских

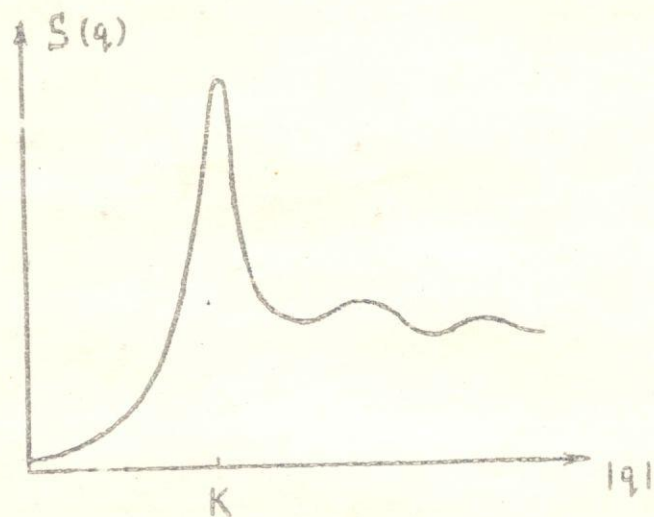


Рис.4. Типичное поведение статического структурного фактора в жидкости.

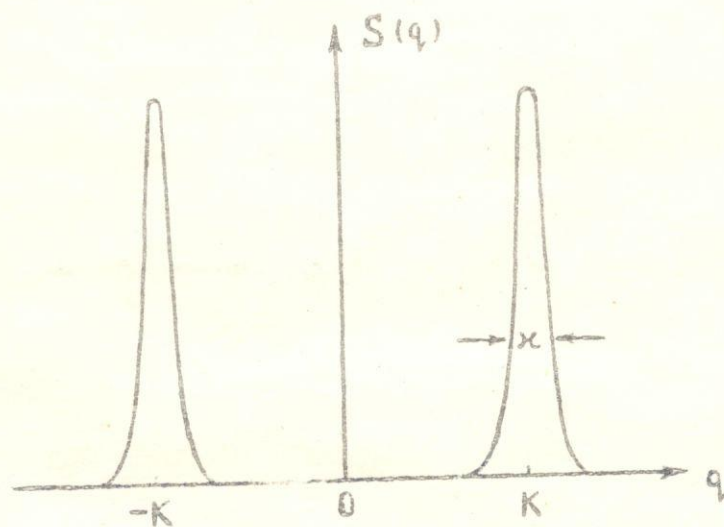


Рис.5. Модельный структурный фактор одномерной жидкости.

лучей или нейтронов. Его типичное поведение в жидкости представлено на рис. 4 [1-4, 64].

Одноэлектронная функция Грина определяется суммированием всевозможных диаграмм типа рис. 3 (Б). Подчеркнем, что помимо перехода к статическому приближению нами уже сделано крайне существенное приближение, согласно которому ионная подсистема полностью описывается функцией Грина (2.4), а высшие функции Грина не учитываются. На языке статического приближения это приближение соответствует предположению о полной факторизации высших ионных корреляторов через парные, определяющие статический структурный фактор жидкости [43, 44, 49]. Это предположение означает, что мы рассматриваем своего рода Гауссовскую модель жидкости.

В статическом приближении нетрудно получить формальное выражение для усредненной по ионным конфигурациям одноэлектронной функции Грина в виде фейнмановского интеграла по траекториям [65], эквивалентного сумме ряда всевозможных диаграмм теории возмущений. При этом мы следуем методу работ [66, 67]. Если пренебречь движением ионов, то задача сводится к определению функции Грина электрона в потенциальном поле — суперпозиции псевдопотенциалов ионов. Соответствующий фейнмановский интеграл имеет вид (в координатно-временном представлении):

$$G(r, r'; t) = \int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left[\frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} - \right. \right. \quad (2.13)$$

Здесь $\int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau)$ означает функциональный интеграл по мере Винера-Фейнмана [65]; r и r' — конечная и начальная точка

движения, t - время движения.

Пусть заданы N - частичные функции распределения ионов. $F_N(R_1 \dots R_N)$. Тогда, проводя усреднение зависящего от ионных конфигураций множителя в (2.13) получаем:

$$\begin{aligned} & \langle \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_i \int_0^t d\tau V(r(\tau) - R_i) \right\} \rangle = \\ & = \frac{1}{V^N} \int dR_1 \dots \int dR_N \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_i \int_0^t d\tau V(r(\tau) - R_i) \right\} F_N(\dots) \quad (2.14) \\ & = \exp \left\{ \sum_n \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_0^t d\tau_1 \dots \int_0^t d\tau_n \langle \sum_i V(r(\tau_1) - R_i) \dots \right. \\ & \quad \left. \dots \sum_j V(r(\tau_n) - R_j) \rangle_c \right\} \equiv \exp \left\{ \sum_n \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n K_n \right\} \end{aligned}$$

где $\langle \dots \rangle_c$ - "кумулянтные" средние [68], V - объем системы. Тогда усредненная функция Грина имеет вид:

$$\langle G(r, r'; t) \rangle = \int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m \dot{r}^2(\tau)}{2} + \sum_n \left(\frac{i}{\hbar} \right)^n K_n \right\} \quad (2.15)$$

Ограничиваясь $n=2$ ($n=1$ дает тривиальный фазовый множитель), т.е. используя гауссово приближение, получаем формальное решение:

$$\begin{aligned} \langle G(r, r'; t) \rangle & = \int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m \dot{r}^2(\tau)}{2} - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau' \int_0^t d\tau W[r(\tau) - r(\tau')] \right\} \quad (2.16) \end{aligned}$$

где, как нетрудно убедиться:

$$\begin{aligned} \tilde{r} & = r - v_0 t \\ \tilde{r}' & = r' - v_0 t' \end{aligned}$$

$$\tilde{r} = \tilde{r} - v_0$$

$$W[r(\tau) - r(\tau')] = \frac{1}{N} \sum_q |K_{p+q}/V|p|^2 S(q) e^{iq[r(\tau) - r(\tau')]} \quad (2.17)$$

Представление (2.16) будет использовано в дальнейшем при анализе физического смысла нашей модели "жидкого полупроводника". Легко видеть, что (2.16) эквивалентно сумме всевозможных диаграмм типа рис.3(б). Более общее представление (2.15) учитывает, в принципе, все высшие ионные корреляторы [49].

В заключение этого параграфа укажем связь статического структурного фактора жидкости с парной корреляционной функцией ионов:

$$\begin{aligned} S(q) &= \frac{1}{V^N} \int dR_1 \dots \int dR_N F_N(R_1 \dots R_N) \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{-iq(R_i - R_j)} = \\ &= \frac{N(N-1)}{V^2} \int dR_i \int dR_j F_2(R_i R_j) e^{-iq(R_i - R_j)} + \frac{1}{V} \int dR_i F_1(R_i) \end{aligned}$$

что после замены переменной $R = R_i - R_j$ и перехода к термодинамическому пределу ($N \rightarrow \infty$; $V \rightarrow \infty$; $\frac{N}{V} \rightarrow const$) дает:

$$S(q) = 1 + \frac{N}{V} \int dR e^{-iqR} \{F_2(R) - 1\} + \frac{N}{V} (2\pi)^3 S(q) \quad (2.18)$$

§2. Одномерная модель [50, 51].

Рассмотрим сначала одномерную модель жидкости. Структурный фактор будем моделировать двумя узкими пиками при $q = \pm K$ (см.рис.5), что является естественным аналогом рис.4 в одномерном случае. Можно ожидать, что вектора $q = \pm K$, соответствующие максимумам структурного фактора, являются аналогами векторов обратной решетки кристалла, определяющими гра-

ницы первой зоны Бриллюэна. "Зонные" эффекты в спектре электронов жидкости могут проявиться, если выполнено условие $2p_F \cong \cong K$, где p_F - импульс Ферми свободных электронов, т.е. когда размер Ферми поверхности сравним с размерами "первой зоны". Заметим, что в работе [69] отмечалось появление положительного температурного коэффициента электропроводности для ряда расплавов группы В именно тогда, когда диаметр поверхности Ферми в импульсном пространстве, вычисленный из данных по эффекту Холла, $2p_F = \left(\frac{3\pi^2}{eR}\right)^{1/3}$, равен вектору K , соответствующему первому максимуму структурного фактора $S(q)$. Поэтому мы принимаем условие $2p_F = K$, так что уровень Ферми свободных электронов проходит через точки вырождения их спектра, в которых (для одномерной системы) образуются брэгговские разрывы в случае идеальной периодической структуры (см. рис. 6).

Тогда из (2.12) имеем (L - длина системы):

$$\begin{aligned} \sum (i\varepsilon_n p) &= \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} | \langle p+q | V | p \rangle |^2 S(q) \{ i\varepsilon_n - \xi_{p+q} \}^{-1} \approx \\ &\approx \Delta^2 \{ i\varepsilon_n - \xi_{p+K} \}^{-1} + \Delta^2 \{ i\varepsilon_n - \xi_{p-K} \}^{-1} \end{aligned} \quad (2.19)$$

где

$$\Delta^2 = \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} | \langle p+q | V | p \rangle |^2 S(q) \quad (2.20)$$

Мы воспользовались здесь характерной структурой $S(q)$ с двумя узкими пиками при $q = \pm K$. (Интеграл (2.20) берется по окрестности одного пика).

Из рис. 6 видны следующие свойства симметрии спектра свободных электронов в одномерном случае:

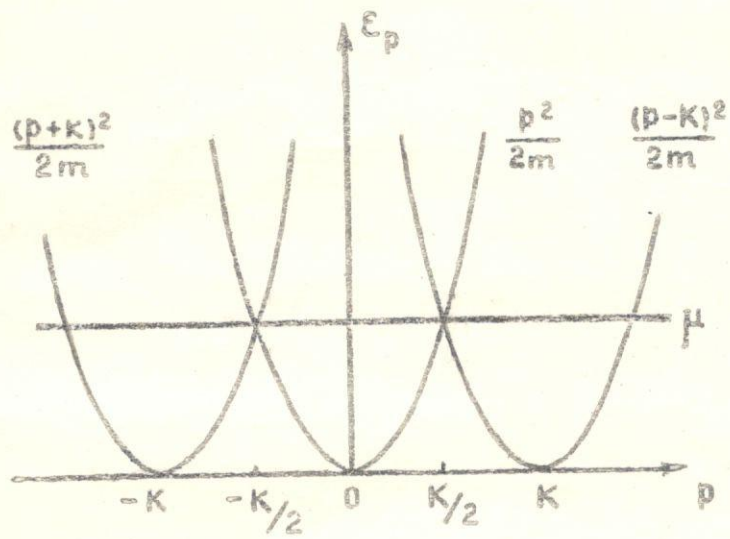


Рис.6.Спектр свободных электронов и положение уровня Ферми.

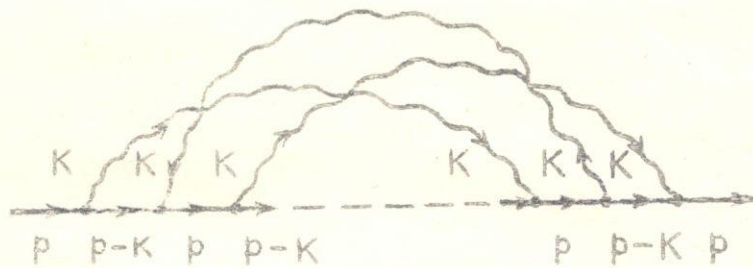


Рис.7.Типичная диаграмма в разложении одноэлектронной функции Грина.

$$\sum_{p-k} = -\sum_p \quad \text{при } p \sim +K/2$$

$$\sum_{p+k} = -\sum_p \quad \text{при } p \sim -K/2$$

(2.21)

Тогда, рассматривая электрон с $p \sim +K/2$ (рассмотрение $p \sim -K/2$ аналогично), можем учитывать только первое слагаемое в правой части (2.19):

$$\sum (\varepsilon_n p) = \Delta^2 G_0 (\varepsilon_n; -\sum_p) \quad (2.22)$$

так как в знаменателе второго слагаемого (2.19) при этом стоит большая энергия $\sum_{p+k} > \varepsilon_F$ ($\varepsilon_F = \mu$ — энергия Ферми свободных электронов) и всюду предполагается $|\Delta| \ll \varepsilon_F$.

Приближенное интегрирование в (2.19) (пренебрежение шириной пиков структурного фактора) оправдано, если выполнены условия

$$\chi \equiv \frac{1}{R_c} \ll |p - p_F| \quad (2.23)$$

или $v_F \chi \ll 2\pi T$

где χ — ширина пиков, v_F — скорость Ферми свободных электронов. Параметр R_c , определенный в (2.23), играет в одномерном случае роль радиуса корреляций ближнего порядка. Оценку (2.23) нетрудно понять; если $S(q)$ имеет острые пики при $q = \pm K$, то в первой строке (2.19) можно провести разложение в ряд Тейлора в окрестности пиков. Например, для вклада окрестности левого пика

$$\sum (\varepsilon_n p) \approx \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \times \{i\varepsilon_n - \sum_{p-k}\}^{-1} \{1 + v_F(q+K)[i\varepsilon_n - \sum_{p-k}]^{-1} + \dots\} \approx \quad (2.24)$$

$$\approx \Delta^2 \{i\varepsilon_n - \zeta_{p-k}\}^{-1} \{1 + v_F x [i\varepsilon_n - \zeta_{p-k}]^{-1} + \dots\}$$

Имеем:

$$\left| \frac{v_F x}{i\varepsilon_n - \zeta_{p-k}} \right| = \left| \frac{v_F x}{i\varepsilon_n + \zeta_p} \right| < \frac{v_F x}{\text{Max}\{|\zeta_p|, 2\pi T\}}$$

так, что поправки от конечной ширины пиков малы при условии $v_F x \ll \text{Max}\{|\zeta_p|, 2\pi T\}$, что совпадает с (2.23). Таким образом, при выполнении (2.23), можно заменить реальное взаимодействие в жидкости $|\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q)$ на модельное $2\pi \frac{N}{L} \Delta^2 \delta(q \neq K)$, что сразу сводит (2.19) к (2.22). При этом не учтенное взаимодействие имеет вид

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^2(q) = & |\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q) - \\ & - 2\pi \frac{N}{L} \Delta^2 \delta(q \neq K) \end{aligned} \quad (2.25)$$

и может рассматриваться как малое возмущение.

Следует подчеркнуть, что введение модельного взаимодействия, передающего фиксированный волновой вектор, не означает введения дальнего кристаллического порядка. Рассмотрение ведется в предположении микроскопически однородной жидкости, после перехода к термодинамическому пределу. Условия (2.23) накладывают ограничения в смысле достаточной величины радиуса корреляций ближнего порядка. Формально мы рассматриваем асимптотику радиуса корреляций, стремящегося к бесконечности внутри системы бесконечных размеров (термодинамический предел), т.е. $L \rightarrow \infty$; $R_c \rightarrow \infty$, но $\frac{R_c}{L} \rightarrow 0$, что, естественно, не означает введения дальнего порядка. Присутствие дальнего порядка ($\frac{R_c}{L} \rightarrow \text{const}$) влечет появление "аномальных" функций Грина, описывающих процессы переброса [70], существенно меняющих структуру уравнений

(см. ниже в Главах III, V).

С введенным выше модельным взаимодействием мы можем теперь просуммировать все существенные диаграммы. Нетрудно видеть, что в каждом порядке теории возмущений одинаковый вклад дают диаграммы с чередующейся последовательностью гриновских функций $\{i\varepsilon_n - \xi_p\}^{-1}$ и $\{i\varepsilon_n + \xi_p\}^{-1}$ (мы рассматриваем $p \sim +K/2$) и чередующейся последовательностью вершин с входящими или выходящими линиями взаимодействия, передающими импульс $\pm K$ (см. рис. 7). Диаграммы, в которых нарушается чередование передачи импульса $\pm K$, несущественны, т.к. в них появляются большие знаменатели, приводящие к малости по параметру $|\frac{\xi_p}{\varepsilon_F}|$ [50]. Общий член разложения для одноэлектронной функции Грина имеет теперь вид:

$$g_n(\varepsilon p) = n! \frac{\Delta^{2n}}{(i\varepsilon_l + \xi_p)^n (i\varepsilon_l - \xi_p)^n} \frac{1}{i\varepsilon_l - \xi_p} =$$

$$= n! Z^n(\varepsilon_l \xi_p) G_0(\varepsilon_l \xi_p) \quad (2.26)$$

где Δ^2 определено в (2.20), n - порядок теории возмущений по Δ^2 , $Z(\varepsilon_l \xi_p) = \Delta^2 G_0(\varepsilon_l \xi_p) G_0(\varepsilon_l - \xi_p)$. Множитель $n!$ появляется 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:

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dz e^{-z} (z z)^n = \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{1}{1 - z z} \quad (2.27)$$

Тогда одноэлектронная функция Грина есть:

$$G(\varepsilon, p) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\varepsilon, p) = \langle G_{z\Delta^2}(\varepsilon, p) \rangle \equiv$$

$$\equiv \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{i\varepsilon + zp}{(i\varepsilon)^2 - zp^2 - z\Delta^2} \quad (2.28)$$

где

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon, p) = \frac{i\varepsilon + zp}{(i\varepsilon)^2 - zp^2 - \Delta^2} \quad (2.29)$$

представляет собой так называемую нормальную функцию Грина идеального полупроводника с энергетической щелью в спектре, равной $2/|\Delta|$. Таким образом, рассматриваемая модель неупорядоченной системы оказывается эквивалентной ансамблю идеальных полупроводников, энергетическая щель в спектре которых принимает случайные значения с распределением специального вида. В самом деле, (2.28) представляется в виде:

$$G(\varepsilon, p) = \int_0^{\infty} dW \mathcal{P}\{W\} G_{W^2}(\varepsilon, p) \quad (2.30)$$

где

$$\mathcal{P}\{W\} = \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \quad (2.31)$$

т.е. распределение Рэлея, хорошо известное в статистической радиофизике [71].

Использованный нами метод аналогичен применявшемуся Л.В.Келдышем при изучении "хвостов" плотности состояний в сильно легированных полупроводниках, где асимптотический учет крупномасштабных флуктуаций случайного поля проводится посредством суммирования всевозможных диаграмм с фиксированным (нулевым) передаваемым импульсом [72, 73].

Полезно понять вид случайного поля, которому соответствуют используемые приближения. Это легко сделать, применяя функциональное представление (2.16). Используя в (2.17) характерную структуру $S(q)$ в виде двух острых пиков при $q = \pm K$ (рис. 5) $S(q) = S_1(q) + S_2(q)$ и вводя переменную x (отклонение от центра пика) посредством $q = \pm K + x$ ($S_1(x) = S_2(x) = S(x)$) получаем:

$$\begin{aligned} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' W[r(\tau) - r(\tau')] &= \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |K\rho + q|V|\rho\rangle|^2 S(q) \times \\ &\times \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iqr(\tau)} e^{-iqr(\tau')} = \\ &= \frac{L}{N} \int \frac{dx}{2\pi} |V_x|^2 S_1(x) \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{iKr(\tau)} e^{ixr(\tau)} e^{-iKr(\tau')} e^{-ixr(\tau')} + \\ &+ \frac{L}{N} \int \frac{dx}{2\pi} |V_x|^2 S_2(x) \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{-iKr(\tau)} e^{ixr(\tau)} e^{iKr(\tau')} e^{-ixr(\tau')} = \\ &= \frac{L}{N} \int \frac{dx}{2\pi} |V_x|^2 S(x) \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{ixr(\tau)} e^{-ixr(\tau')} \times \\ &\times 2 \cos K[r(\tau) - r(\tau')] = 2 \frac{L}{N} \int \frac{dx}{2\pi} |V_x|^2 S(x) \times \\ &\times \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{ixr(\tau)} e^{-ixr(\tau')} \{ \cos Kr(\tau) \cos Kr(\tau') + \sin Kr(\tau) \sin Kr(\tau') \} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Наше основное приближение соответствует $x \rightarrow 0$, так что

$$\begin{aligned} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' W[r(\tau) - r(\tau')] &\approx 2\Delta^2 \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' \times \\ &\times \{ \cos Kr(\tau) \cos Kr(\tau') + \sin Kr(\tau) \sin Kr(\tau') \} = \\ &= 2\Delta^2 \left\{ \int_0^t d\tau \cos Kr(\tau) \right\}^2 + 2\Delta^2 \left\{ \int_0^t d\tau \sin Kr(\tau) \right\}^2 \end{aligned} \quad (2.33)$$

где Δ^2 определено в (2.20).

Тогда получаем представление:

$$\begin{aligned}
 & \exp \left\{ -\frac{1}{2\hbar^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' W [r(\tau) - r(\tau')] \right\} \approx \\
 & \approx \exp \left\{ -\frac{\Delta^2}{\hbar^2} \left[\int_0^t d\tau \cos Kr(\tau) \right]^2 \right\} \exp \left\{ -\frac{\Delta^2}{\hbar^2} \left[\int_0^t d\tau \sin Kr(\tau) \right]^2 \right\} \\
 & = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2 + 2ix} \frac{|\Delta|}{\hbar} \int_0^t d\tau \cos Kr(\tau) \\
 & \quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2 + 2iy} \frac{|\Delta|}{\hbar} \int_0^t d\tau \sin Kr(\tau)
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

Так, что после очевидных замен переменных получаем функцию Грина (2.16) в виде:

$$\begin{aligned}
 G(r, r'; t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dV_x}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{V_x^2}{\Delta^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dV_y}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{V_y^2}{\Delta^2}} \times \\
 & \times \int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_0^t d\tau \frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} - \right. \\
 & \quad \left. - 2 \int_0^t d\tau V_x \cos Kr(\tau) - 2 \int_0^t d\tau V_y \sin Kr(\tau) \right\}
 \end{aligned} \tag{2.35}$$

Переходя к полярным координатам в плоскости $\{V_x; V_y\}$, т.е. вводя $W = \sqrt{V_x^2 + V_y^2}$; $\varphi = \arctg \frac{V_y}{V_x}$, получаем:

$$\begin{aligned}
 G(r, r'; t) &= \int_0^{\infty} dW \frac{2W}{\Delta^2} e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \times \\
 & \times \int_{r(0)=r'}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) \exp \frac{i}{\hbar} \left\{ \int_0^t d\tau \left[\frac{m\dot{r}^2(\tau)}{2} - 2W \cos(Kr(\tau) + \varphi) \right] \right\} =
 \end{aligned}$$

$$= \int_0^{\infty} dW P\{W\} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} g_{2W \cos(Kr+\varphi)}(rr'; t) \quad (2.36)$$

где $P\{W\}$ - распределение Рэлея, $g_{2W \cos(Kr+\varphi)}(rr'; t)$ - одноэлектронная функция Грина в периодическом поле вида $2W \cos(Kr+\varphi)$. Если теперь перейти в импульсное представление и найти нормальную функцию Грина в этом поле, то в простейшем (двухволновом) приближении (см. ниже §5, Гл. III, У) она имеет вид (2.29), так что (2.36) сводится к (2.31). Соответствующая аномальная функция Грина обращается в нуль из-за усреднения по фазе в (2.36), что соответствует отсутствию в системе дальнего порядка. Таким образом наша модель (в одномерном случае) эквивалентна рассмотрению электрона, распространяющегося в поле вида $2W \cos(Kr+\varphi)$, амплитуда которого не зависит от координаты и распределена по Рэлею (2.31), а фаза однородно распределена в интервале $(0, 2\pi)$ *). Возникновение распределения Рэлея тесно связано с гауссовским характером случайного поля [71]. Как указывалось выше, гауссовость была заложена в теорию, когда мы предположили факторизацию высших ионных корреляторов через парные.

Пренебрежение шириной пиков структурного фактора очевидно, соответствует пренебрежению крупномасштабными флукту-

*) Отметим, что случайное поле такого вида удовлетворяет условию эргодичности Слуцкого [71]. Эргодичность случайного поля требуется при доказательстве "самоусредняемости" физических величин в теории неупорядоченных систем [74].

ациями амплитуды поля на расстояниях порядка $R_c \propto \kappa^{-1}$.
 (Ср. соответствующее рассмотрение в [72, 73]). Эти флуктуации приводят к дополнительному рассеянию с временами порядка $\tau \sim \frac{R_c}{v_F} \propto (v_F \kappa)^{-1}$. Влиянием этого рассеяния можно в первом приближении пренебречь, если $v_F \kappa \ll \xi_p$, что совпадает в первом из условий (2.23) Оно также не играет роли при $v_F \kappa \ll T$ (второе условие (2.23)).

Вернемся к анализу (2.28 и (2.30). Совершая обычным образом аналитическое продолжение к действительным частотам, получаем запаздывающую (опережающую) функцию Грина. Плотность электронных состояний может быть найдена по формуле:

$$N(\varepsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon z_p) \quad (2.37)$$

где N_0 - плотность состояний свободных электронов.

Из (2.28) имеем:

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G^{R,A}(\varepsilon z_p) &= \mp (\varepsilon + z_p) \int_0^{\infty} dz e^{-z} \delta(\varepsilon^2 - z_p^2 - z \Delta^2) = \\ &= \mp \frac{\pi}{\Delta^2} (\varepsilon + z_p) \theta(\varepsilon^2 - z_p^2) e^{-\frac{\varepsilon^2 - z_p^2}{\Delta^2}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

так что плотность состояний имеет вид

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \left| \frac{\varepsilon}{\Delta} \right| \int_0^{\varepsilon/\Delta^2} dz \frac{e^{-z}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} - z}} = \quad (2.39)$$

$$= 2 \left| \frac{\varepsilon}{\Delta} \right| \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}\right) \operatorname{Erfi}\left(\frac{\varepsilon}{\Delta}\right)$$

где $\operatorname{Erfi} x = \int_0^x dx e^{x^2}$ - интеграл вероятностей от мнимого аргумента. Графически плотность состояний (2.39) представлена на рис. 8. Мы получили, таким образом, "псевдо-цель" типа предлагавшейся в многочисленных работах для интер-

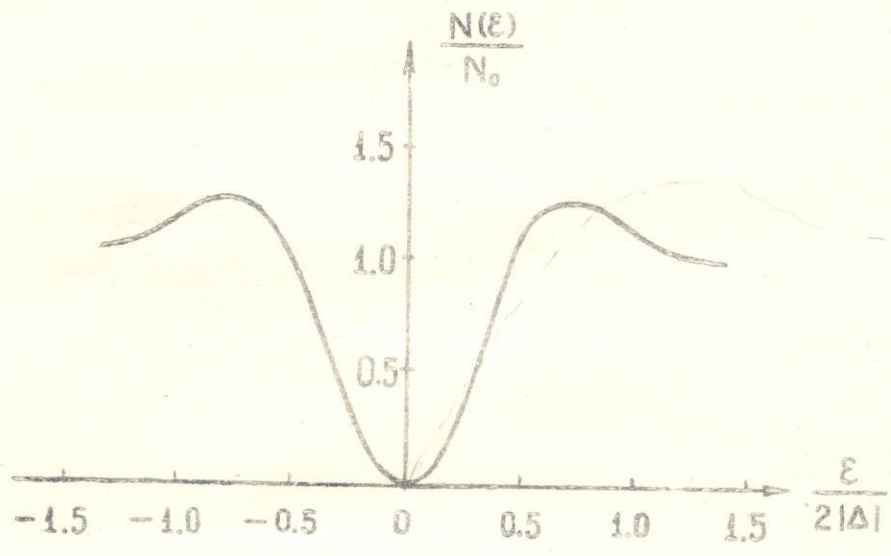


Рис 8. Плотность состояний в модели жидкого полупроводника.

претации свойств "жидких полупроводников" (см. Гл. I). Ширина псевдощели по порядку величины равна ширине запрещенной зоны соответствующего кристалла. Асимптотическое поведение (2.39) имеет вид:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow \infty \\ 2\varepsilon^2/\Delta^2 & \text{при } |\varepsilon| \rightarrow 0 \end{cases} \quad (2.40)$$

Первое из условий (2.23) указывает на неприменимость полученных формул в непосредственной окрестности уровня Ферми $\varepsilon \sim 0$. При $R_c \geq 20a$, где a - среднее межатомное расстояние, это ограничение распространяется на область $|\zeta_p| \leq 0.05 \varepsilon_F$, что при типичных $|\Delta| \sim 0.1-0.2 \varepsilon_F$ составляет 0.1-0.2 от ширины псевдощели. Ситуация улучшается с ростом R_c . Тем не менее обращение плотности состояний в нуль по середине псевдощели нефизично (см. ниже §5). Отметим, что для "жидких полупроводников" типична оценка $T \sim |\Delta|$, так что второе условие (2.23) выполнено уже при $R_c \geq 10a$.

Приведем для полноты выражения для $Re G^{R,A}(\varepsilon \zeta_p)$ соответствующие (2.28), (2.30):

$$Re G^{R,A}(\varepsilon \zeta_p) = \begin{cases} \frac{\varepsilon + \zeta_p}{\Delta^2} e^{-\frac{\varepsilon^2 - \zeta_p^2}{\Delta^2}} \overline{Ei}\left(\frac{\varepsilon^2 - \zeta_p^2}{\Delta^2}\right); & \varepsilon^2 - \zeta_p^2 \geq 0 \\ \frac{\varepsilon + \zeta_p}{\Delta^2} e^{\frac{|\varepsilon^2 - \zeta_p^2|}{\Delta^2}} Ei\left(\frac{|\varepsilon^2 - \zeta_p^2|}{\Delta^2}\right); & \varepsilon^2 - \zeta_p^2 < 0 \end{cases} \quad (2.41)$$

$Ei(-x) \approx \ln x \quad (x \rightarrow +0)$
 $\overline{Ei}(+x) \approx \ln x$

где $Ei(x)$, $\overline{Ei}(x)$ - интегральные показательные функции. Подчеркнем, что полученная функция Грина не обладает особенностями полюсного типа в окрестности уровня Ферми и в этом смысле не описывает спектр элементарных возбуждений в области энергий, соответствующих псевдощели. Это не удивительно, так как рассматривается функция Грина, усредненная по ансамблю ионных кон-

фигурацией, которая описывает среднестатистический электрон [31, 32.] для которого отсутствует понятие спектра элементарных возбуждений.

Выше считалось, что уровень Ферми проходит как раз по середине псевдощели: $\varepsilon_F = \mu_0 = \frac{\kappa^2}{8m}$. Наше рассмотрение остается в силе при произвольном положении уровня Ферми $\mu = \mu_0 + \Delta\mu$. Будем считать, что начало отсчета энергии помещено в точке μ_0 и введем $\tilde{\zeta}_p = \frac{p^2}{2m} - \mu_0$, удовлетворяющую (2.21). Свободная функция Грина имеет вид $\{i\varepsilon_n + \mu - p^2/2m\}^{-1} = \{i\varepsilon_n + \Delta\mu - \tilde{\zeta}_p\}^{-1}$, так что в (2.28), (2.30) происходит простая замена

$$i\varepsilon_n \rightarrow i\varepsilon_n + \Delta\mu; \quad \zeta_p \rightarrow \tilde{\zeta}_p.$$

§3. Трехмерная модель [50, 51].

Обобщение полученных выше результатов на трехмерный случай сталкивается с определенными трудностями. В частности, если в (2.12) воспользоваться обычным приближением локального псевдопотенциала, то при интегрировании по полярному углу между векторами p и q возникает характерное логарифмическое выражение для собственно-энергетической части [44-49], существенно менее сингулярное в интересующей нас области энергий, чем (2.19), и приводящее лишь к слабым изменениям в плотности состояний в сравнении со случаем свободных электронов. Дело в том, что в то время как предположение о существовании узких пиков структурного фактора в одномерном случае означает наличие дальнедействующего ближнего порядка в системе, аналогичное предположение в трехмерном случае, вообще говоря, этого не означает. В трехмерной системе ближний порядок определяется также жесткими угловыми (ориентационными) корреляциями, которые не отражаются на изо-

тропном структурном факторе $S(q)$ (парной корреляционной функции), а содержатся в высших корреляторах. Займаном [49] указывалось, что при определенных предположениях относительно высших корреляционных функций ионов (в частности, четырехионной) возможно появление вкладов в электронную собственно-энергетическую часть, имеющих "одномерный" вид типа (2.19). Не отрицая такой возможности мы хотим отметить, что эти предположения представляются слишком жесткими ("поликристаллическая" структура жидкости), тем более, что в настоящее время не известны теоретические или экспериментальные методы, позволяющие надежно определить высшие ионные корреляторы в жидкости. Кроме того, переход к высшим порядкам возмущений по псевдопотенциалу довольно проблематичен [42] и во всяком случае вносит дополнительную малость по параметру $\frac{\langle p+q|V|p\rangle}{\epsilon_F} \ll 1$, что находится в противоречии с ожидаемой шириной псевдощели - порядка запрещенной зоны в соответствующем кристалле. (Обычная зонная структура в методе псевдопотенциала получается из секулярного уравнения второго порядка [42]). Между тем оказывается достаточным наложить только одно условие на ионный псевдопотенциал (существенно основанное на его не локальности), чтобы получить в трехмерном случае результат типа (2.22). Матричный элемент $\langle p+q|V|p\rangle$ нелокального псевдопотенциала зависит не только от $|q|$, но в общем случае и от $|p|$ и $|p+q|$, т.е. и от взаимной ориентации векторов p и q [42]. При этом по некоторым расчетам [42, 47] оказывается, что в интересующей нас области $|q| \sim 2p_F$ псевдопотенциал, соответствующий рассеянию "почти назад", существенно больше, чем для рассеяния на меньшие углы. Типичная зависимость [47] матричного элемента $\langle p+q|V|p\rangle$

($|p| \sim p_F$; $|q| \approx 2p_F$) от угла рассеяния показана на рис.9. 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 $|q| \approx |K| \approx 2p_F$) показана на рис.10. Тогда из (2.12) получаем (Ω_0 - объем, приходящийся на один атом)

$$\begin{aligned} \sum (\varepsilon_n p) &= \Omega_0 \int_0^\infty dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d \cos \theta \frac{|\langle p+q|V|p \rangle|^2}{i\varepsilon_n - \xi_{|p+q|}} S(q) \approx \\ &\approx \Delta^2 \{i\varepsilon_n - \xi_{|p|-|K|}\}^{-1} \end{aligned} \quad (2.42)$$

и задача сводится к "одномерной". Здесь:

$$\Delta^2 = \frac{\Omega_0}{4\pi^2} \int_0^\infty dq q^2 \int_{-1}^1 d \cos \theta |\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q) \quad (2.43)$$

Мы предполагаем выполненными условия (2.23), а интегрирование по $\cos \theta$ считаем эффективно обрезанным в интервале

$$\begin{aligned} |\delta\theta|^2 &\ll \left| \frac{p-p_F}{p_F} \right| && \text{или} \\ |\delta\theta|^2 &\ll \frac{2\pi T}{\varepsilon_F} \end{aligned} \quad (2.44)$$

вблизи $\theta \sim \pi$, что выделяет узкий конус, соответствующий доминирующей роли рассеяния назад. Критерий (2.44), позволяющий в первом приближении пренебречь вкладом остальных углов, выводится аналогично (2.23) (Ср. (2.24)). При $|p-p_F| \sim 0.05 p_F$ имеем $|\delta\theta| \leq 0.22$. Итак, в трехмерном варианте нашей модели реальное взаимодействие $|\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q)$ заменяется модельным $\frac{4\pi^2}{K^2 \Omega_0} \Delta^2 \delta(q-K) \delta(\cos \theta + 1)$. Оставшееся не учтенным взаимодействие

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}^2(p, p') &= |\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q) - \frac{4\pi^2}{K^2 \Omega_0} \Delta^2 \delta(q-K) \times \\ p' &= p+q && \times \delta(\cos \theta + 1) \end{aligned} \quad (2.45)$$

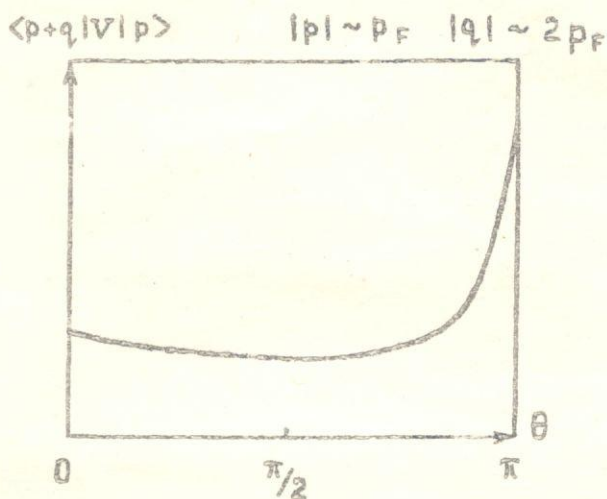


Рис.9. Типичная зависимость псевдопотенциала от угла рассеяния.

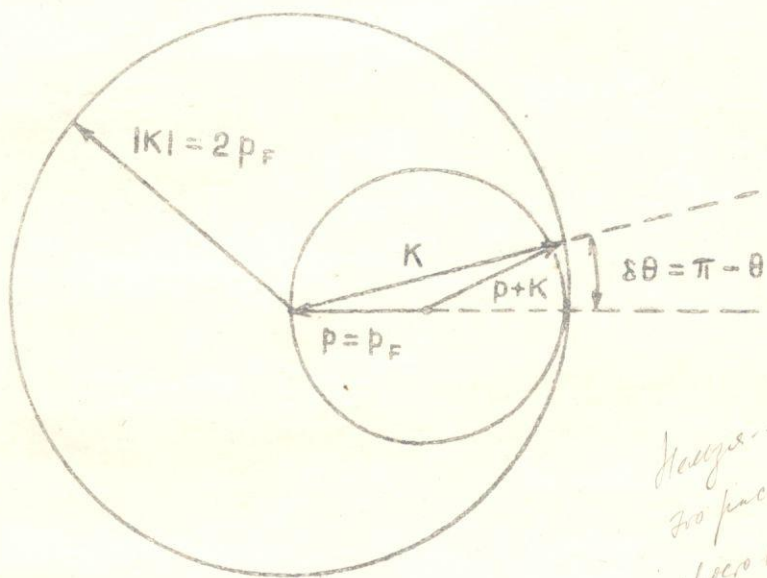


Рис.10. Рассеяние $p \rightarrow p+q$. Доминирует рассеяние в конус $\delta\theta$.

Малый круг-сфера Ферми.

Надо ли думать, что
 это рассеяние доминирует
 если в силу того, что будет
 быть конус или сферический
 конус от ф.н.!!
 То.о. то будет, как конфигурация
 все будет сферическим!!
 должна быть $\omega_c \approx \epsilon_F$
 почему ф.н.?
 Расс. "назад" доминирует конус??

может быть рассмотрено по теории возмущений (см. ниже §5).

Нетрудно видеть, что в трехмерном случае вместо (2.21) имеет место:

$$\sum |p| - |k| = -\sum |p| \quad \text{при } |p| \sim K/2 \quad (2.46)$$

Так что (2.42) сводится к (2.22). Дальнейшее рассмотрение совпадает с (2.26)-(2.31), все формулы остаются в силе и для трехмерной системы.

§4. Диэлектрические и высокочастотные свойства [51].

Представляет интерес исследовать в рассматриваемой модели свойства вершинной части, описывающей отклик системы на внешнее электромагнитное возмущение. Имеем следующее выражение для вариации одноэлектронной функции Грина при введении внешнего поля [21]:

$$\frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} = G(\epsilon p) J^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) G(\epsilon + \omega p + q) \quad (2.47)$$

где $\delta A_\mu(q\omega) = \{\delta A_{q\omega}; -\delta \varphi_{q\omega}\}$ - вариация внешнего поля, $J^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q)$ - искомая вершинная часть.

При этом для свободной функции Грина имеем:

$$\frac{\delta G_0(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} = G_0(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) G_0(\epsilon + \omega p + q) \quad (2.48)$$

где свободная вершина:

$$J_0^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) = \begin{cases} -\frac{e}{mc} p & \mu = 1, 2, 3 \\ e & \mu = 0 \end{cases} \quad (2.49)$$

В рассматриваемой модели вариационная производная (2.47) может быть вычислена непосредственно. В самом деле, из (2.26)-(2.28) имеем:

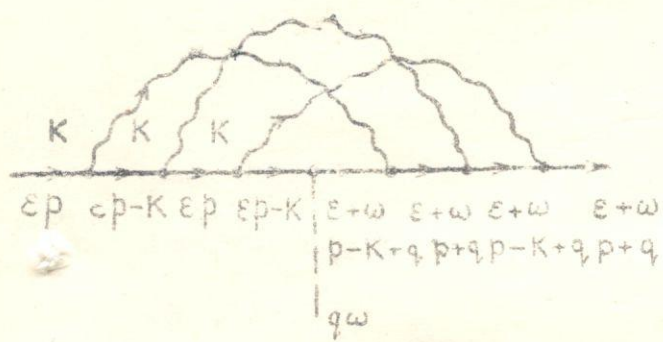
$$\begin{aligned} \frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} &= \frac{\delta}{\delta A_\mu(q\omega)} \left\{ \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} [Z(\epsilon p)]^n \right\rangle_3 G_0(\epsilon p) \right\} = \\ &= \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} [Z(\epsilon p)]^{m-1} \frac{\delta Z(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} [Z(\epsilon + \omega p + q)]^{n-m} \right. \\ &\quad \left. \times G_0(\epsilon + \omega p + q) + \sum_{n=0}^{\infty} [Z(\epsilon p)]^n \frac{\delta G_0(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} \right\rangle_3 \end{aligned} \quad (2.50)$$

так как $\frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)}$ получается из диаграмм типа рис.7 путем вставки линии внешнего поля в любую из электронных линий Рис.7 (см.рис.11а). В (2.50) m - номер того блока $Z(\epsilon p)$ рис.11а, в который входит линия внешнего поля. Используя (2.48), нетрудно убедиться, что (см.рис.11б)

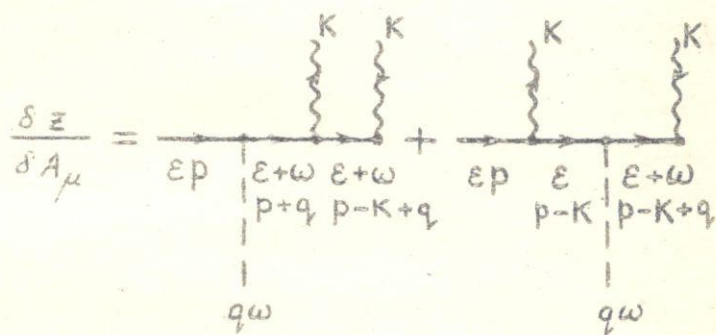
$$\begin{aligned} \frac{\delta Z(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} &= G_0(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p, \epsilon + \omega p + q) Z(\epsilon + \omega p + q) + \\ &\quad + Z(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p - K, \epsilon + \omega p - K + q) G_0(\epsilon + \omega p - K + q) \end{aligned} \quad (2.51)$$

Подставляя (2.48) и (2.51) в (2.50), после некоторых преобразований получим:

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} &= J_0^\mu(\epsilon p, \epsilon + \omega p + q) G_0(\epsilon p) G_0(\epsilon + \omega p + q) \cdot \\ &\quad \cdot \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} Z^n Z^n(\epsilon p) \sum_{m=0}^{\infty} Z^m Z^m(\epsilon + \omega p + q) \right\rangle_3 + \\ &\quad + J_0^\mu(\epsilon p - K, \epsilon + \omega p - K + q) \left\langle \frac{1}{Z \Delta^2} \sum_{n=1}^{\infty} Z^n Z^n(\epsilon p) \sum_{m=1}^{\infty} Z^m Z^m(\epsilon + \omega p + q) \right\rangle_3 \end{aligned} \quad (2.52)$$



(a)



(b)

Рис. II. Диаграммы для вершинной части.

что сразу же сводится к

$$\frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_{\mu}(q\omega)} = \int_0^{\mu} (\epsilon p \epsilon + \omega p + q) \langle G_{3\Delta^2}(\epsilon p) G_{3\Delta^2}(\epsilon + \omega p + q) \rangle_3 + \\ + \int_0^{\mu} (\epsilon p - K \epsilon + \omega p - K + q) \langle F_{3\Delta^2}(\epsilon p) F_{3\Delta^2}(\epsilon + \omega p + q) \rangle_3 \quad (2.53)$$

где $G_{\Delta^2}(\epsilon p)$ определена в (2.29), тогда как

$$F_{\Delta^2}(i\epsilon_n p) = \frac{\Delta}{(i\epsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2} \quad (2.54)$$

представляет собой аномальную функцию Грина идеального полупроводника, описывающую элементарный процесс переброса $p \rightarrow p - K$ (см. ниже §5, Гл. III, У).

Мы видим, что в рассматриваемой модели электромагнитная реакция описывается теми же формулами, что и в идеальном полупроводнике типа экситонного изолятора [75, 76], но с флуктуирующей энергетической щелью. При этом возникают конечные выражения, связанные со средними от парных произведений аномальных функций Грина, тогда как сама средняя аномальная функция Грина, как отмечалось выше, равна нулю, что соответствует отсутствию в системе дальнего порядка. Введенное выше модельное взаимодействие является прямым аналогом брэгговского рассеяния в идеальном кристалле и ответственно за формирование своего рода зонной структуры (псевдощель) в спектре электронов. Однако подобно рассеянию в идеальном кристалле оно недостаточно для правильного описания кинетики, для чего следует учесть диссипативное рассеяние (аналог дефектов и фононов в кристалле), связанное с отброшенной

частью реального взаимодействия (2.45), в одномерном случае соответствующее крупномасштабным флуктуациям амплитуды случайного поля (см. §2 и ниже §5).

Перейдем к рассмотрению диэлектрических свойств нашей системы. Поскольку поляризационный оператор непосредственно связан со скалярной вершиной, из (2.53) имеем:

$$\begin{aligned} \Pi(q\omega_m) &= -2 \int_0^\infty dz e^{-zT} \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \left\{ G_{z\Delta^2}(\epsilon_n p) \times \right. \\ &\times G_{z\Delta^2}(\epsilon_n + \omega_m p + q) + F_{z\Delta^2}(\epsilon_n p) F_{z\Delta^2}(\epsilon_n + \omega_m p + q) \left. \right\} \equiv \\ &\equiv \langle \Pi_{\Delta^2}(q\omega_m) \rangle \end{aligned} \quad (2.55)$$

Проводя стандартным образом суммирование по мацубаровским частотам и выполняя аналитическое продолжение $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$, после громоздких выкладок получаем [75]:

$$\begin{aligned} \Pi_{\Delta^2}(q\omega) &= -\frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{p+q} + \beta_p \beta_{p+q} + \Delta^2}{E_p E_{p+q}} \left\{ f(E_p) - \right. \\ &- f(E_{p+q}) \left. \right\} \left\{ \frac{1}{E_p - E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p - E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{p+q} - \beta_p \beta_{p+q} - \Delta^2}{E_p E_{p+q}} \left\{ 1 - f(E_p) - f(E_{p+q}) \right\} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{E_p + E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p + E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} \end{aligned} \quad (2.56)$$

- поляризационный оператор идеального полупроводника.

Здесь $E_p = \sqrt{\beta_p^2 + \Delta^2}$; $f(E_p) = \left\{ \exp\left(\frac{E_p}{T}\right) + 1 \right\}^{-1}$ - фермиевская функция распределения.

При $\Delta^2 \rightarrow 0$ второе слагаемое в (2.56) стремится к нулю,

тогда как первое дает обычный поляризационный оператор электронного газа. С другой стороны, при $T \rightarrow 0$, но $\Delta^2 \neq 0$ первый член в (2.56) обращается в нуль, так что

$$\Pi_{\Delta^2}(q\omega) = \frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{p+q} - \frac{3}{2} p^2 p_{p+q} - \Delta^2}{E_p E_{p+q}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{E_p + E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p + E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} \quad (2.57)$$

Диэлектрическая функция определяется через поляризационный оператор как [21]:

$$\epsilon(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi(q\omega) = \langle \epsilon_{3\Delta^2}(q\omega) \rangle_3 \quad (2.58)$$

где

$$\epsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi_{\Delta^2}(q\omega) \quad (2.59)$$

- диэлектрическая функция идеального полупроводника.

Рассмотрим сначала случай $\omega = 0$. При $v_F q \ll |\Delta|$ из (2.57) получим:

$$\Pi_{\Delta^2}(q0) = \frac{v_F^2 q^2}{18} \frac{m p_F}{\pi^2 \Delta^2} = \frac{q^2}{4\pi e^2} \frac{v_F^2 \chi_D^2}{18 \Delta^2} \quad (2.60)$$

так что

$$\epsilon_{\Delta^2}(q0) = 1 + \frac{v_F^2 \chi_D^2}{18 \Delta^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{6 \Delta^2} \quad (2.61)$$

где $\chi_D^2 = \frac{4m p_F e^2}{\pi}$ - квадрат обратного радиуса дебаевской экранировки; $\omega_p^2 = \frac{4\pi n e^2}{m}$ - квадрат плазменной частоты (n - полная плотность электронов).

С другой стороны, при $v_F q \gg |\Delta|$ из (2.56)-(2.57) следует

$$\Pi_{\Delta^2}(q_0) = \frac{mp_F}{\pi^2} = \frac{\kappa_D^2}{4\pi e^2} \quad (2.62)$$

так что получаем

$$\epsilon_{\Delta^2}(q_0) = 1 + \frac{\kappa_D^2}{q^2} \quad (2.63)$$

т.е. обычное дебаевское экранирование.

Мы используем простейшую интерполяцию от (2.61) и (2.63):

$$\epsilon_{\Delta^2}(q_0) = 1 + \frac{\kappa_D^2}{q^2 + 18\Delta^2/v_F^2} \quad (2.64)$$

Тогда для рассматриваемой модели неупорядоченной системы получаем:

$$\begin{aligned} \epsilon(q_0) &= \int_0^{\infty} dz e^{-3z} \epsilon_{3\Delta^2}(q_0) = \\ &= 1 - \frac{v_F^2 \kappa_D^2}{18\Delta^2} \exp\left\{\frac{v_F^2 q^2}{18\Delta^2}\right\} Ei\left(-\frac{v_F^2 q^2}{18\Delta^2}\right) \end{aligned} \quad (2.65)$$

где $Ei(-x)$ - интегральная показательная функция. При $v_F q \gg |\Delta|$ используем асимптотику $Ei(-x) \approx -\frac{e^{-x}}{x}$ и получим (2.63). При $v_F q \ll |\Delta|$ используем $Ei(-x) \approx \ln \gamma x$ где $\ln \gamma = C$ - постоянной Эйлера, так что

$$\epsilon(q_0) \approx 1 - \frac{v_F^2 \kappa_D^2}{18\Delta^2} \ln \gamma \frac{v_F^2 q^2}{18\Delta^2} \quad (2.66)$$

Соответственно, в пределе малых q эффективное кулоновское взаимодействие принимает вид:

$$\Gamma(q_0) = \frac{4\pi\tilde{e}^2}{q^2} \quad (2.67)$$

где

$$\tilde{e}^2 = \frac{e^2}{1 - \frac{v_F^2 \kappa_D^2}{18\Delta^2} \ln \gamma \frac{v_F^2 q^2}{18\Delta^2}} \quad (2.68)$$

что формально напоминает известную ситуацию "нуля-заряда" (вернее "асимптотической свободы") в квантовой теории поля. Таким образом флуктуации щели в спектре нашей системы приводят к полной экранировке заряда, хотя и весьма специфического вида. Поведение $\epsilon(q_0)$ типа (2.66)-(2.68) было недавно получено при рассмотрении так называемых бесщелевых полупроводников [77], однако там оно существенно связано с особенностями кулоновского взаимодействия в системе с бесщелевым спектром.

Перейдем к рассмотрению случая $\omega \neq 0$, $v_F q \ll |\Delta|$. Из (2.57) имеем:

$$\operatorname{Re} \Pi_{\Delta^2}(q\omega) = \frac{v_F^2 q^2}{12} \frac{m p_F}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z}_p \frac{\Delta^2}{(\tilde{z}_p^2 + \Delta^2)^{3/2}} \frac{1}{\tilde{z}_p^2 + \Delta^2 - \frac{\omega^2}{4}} \quad (2.69)$$

$$\operatorname{Im} \Pi_{\Delta^2}(q\omega) = \frac{v_F^2 q^2}{12} \frac{m p_F}{2\pi^2} \frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z}_p \frac{\Delta^2}{(\tilde{z}_p^2 + \Delta^2)^2} \times \quad (2.70)$$

$$\times \left\{ \delta \left[\frac{\omega}{2} - (\tilde{z}_p^2 + \Delta^2)^{1/2} \right] - \delta \left[\frac{\omega}{2} + (\tilde{z}_p^2 + \Delta^2)^{1/2} \right] \right\}$$

Рассмотрим сначала действительную часть диэлектрической функции. Из (2.69) получаем:

$$\operatorname{Re} \epsilon_{\Delta^2}(\omega) = 1 + \frac{\pi n e^2}{2 m} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z}_p \frac{\Delta^2}{(\tilde{z}_p^2 + \Delta^2)^{3/2}} \frac{1}{\tilde{z}_p^2 + \Delta^2 - \frac{\omega^2}{4}} \quad (2.71)$$

При $\omega \rightarrow 0$ / $\omega \ll 2|\Delta|$ / отсюда естественно следует (2.61)

При $\omega \gg 2|\Delta|$ получаем плазменный предел:

$$\operatorname{Re} \varepsilon_{\Delta z}(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.72)$$

Снова используем простейшую аппроксимацию:

$$\operatorname{Re} \varepsilon_{\Delta z}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \theta\left(1 - \frac{\omega^2}{4\Delta^2}\right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \theta\left(\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - 1\right) \quad (2.73)$$

где $\theta(x) = \begin{cases} 1; & x > 0 \\ 0; & x < 0 \end{cases}$. Тогда из (2.58)

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \operatorname{Ei}\left(-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}\right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} [1 - e^{-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}}] \quad (2.74)$$

При $\omega \gg 2|\Delta|$ отсюда следует плазменный предел (2.72).

При $\omega \ll 2|\Delta|$ получаем аналогично (2.66)

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \ln \gamma \frac{\omega^2}{4\Delta^2} \quad (2.75)$$

Подчеркнем, что качественное поведение $\operatorname{Re} \varepsilon(\omega)$ оказывается практически независимым от способа интерполяции типа (2.64), (2.73). Можно объединить (2.66) и (2.75), записав единое выражение, справедливое с логарифмической точностью:

$$\operatorname{Re} \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \ln \gamma \frac{\max\{\omega^2; v_F^2 q^2\}}{4\Delta^2} \quad (2.76)$$

Этот результат справедлив лишь при $\omega \ll 2|\Delta|$; $v_F q \ll |\Delta|$. Интерполяционная формула (2.74) описывает весь интервал частот, также как (2.65) - весь интервал волновых векторов. $\operatorname{Re} \varepsilon(\omega)$, определяемая (2.74) не имеет нулей, кроме плазменного, который возникает в пределе $\omega \gg 2|\Delta|$.

Поведение мнимой части диэлектрической проницаемости представляет особый интерес, так как она определяет, в частности, оптическое поглощение в системе. Поглощение определяется действительной частью проводимости, которая следующим образом связана с $\text{Im} \varepsilon(\omega)$:

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \text{Im} \varepsilon(\omega) \quad (2.77)$$

Из (2.57), (2.58) получаем:

$$\begin{aligned} \text{Im} \varepsilon(\omega) &= \frac{\pi}{4} \frac{ne^2}{m} \int_0^\infty dz e^{-z} \int_{-\infty}^\infty dz_p \frac{z \Delta^2}{(z_p^2 + z \Delta^2)^2} \times \\ &\times \left\{ \delta \left[\frac{\omega}{2} - (z_p^2 + z \Delta^2)^{1/2} \right] - \delta \left[\frac{\omega}{2} + (z_p^2 + z \Delta^2)^{1/2} \right] \right\} = \\ &= 2\pi^2 \frac{ne^2}{m} \frac{|\Delta|}{\omega^3} \int_0^{\omega^2/4\Delta^2} dz e^{-z} \frac{z}{\left(\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - z \right)^{1/2}} = \\ &= \pi \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \frac{|\Delta|}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\omega^2}{4\Delta^2} \right\} \left[\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - \frac{d}{d\alpha} \right] \text{Erfi} \alpha^{1/2} \frac{\omega}{2|\Delta|} \Big|_{\alpha=1} \end{aligned} \quad (2.78)$$

Соответственно:

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \pi \frac{ne^2}{m\omega} \frac{|\Delta|}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\omega^2}{4\Delta^2} \right\} \left[\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - \frac{d}{d\alpha} \right] \times \text{Erfi} \alpha^{1/2} \frac{\omega}{2|\Delta|} \Big|_{\alpha=1} \quad (2.79)$$

Имеем следующее асимптотическое поведение при $\omega \gg 2|\Delta|$:

$$\text{Im} \varepsilon(\omega) \approx \pi \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \left(\frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \quad (2.80)$$

$$\text{Re} \sigma(\omega) \approx \frac{ne^2}{m\omega} \pi \left(\frac{\Delta}{\omega} \right)^2 \quad (2.81)$$

При $\omega \ll 2|\Delta|$:

$$\text{Im } \varepsilon(\omega) \approx \pi \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \quad (2.82)$$

$$\text{Re } \sigma(\omega) \approx \frac{ne^2}{m} \pi \frac{\omega}{6\Delta^2} \rightarrow 0 \text{ при } \omega \rightarrow 0 \quad (2.83)$$

Качественное поведение $\text{Im } \varepsilon(\omega)$ и $\text{Re } \sigma(\omega)$ представлено на рис. 12. Статическая проводимость в рассматриваемом приближении обращается в нуль, что означает своего рода "брэгговскую" локализацию электронов. Аналогичным образом равна нулю статическая проводимость идеального полупроводника при $T=0$, когда нет термического возбуждения носителей в зону проводимости. Таким образом, мы получили аналог обычного мекзонного поглощения (см. рис. 12(б)). Вместе с тем (2.82) (рис. 12(а)) показывает, что рассматриваемая модель описывает вещество, промежуточное между металлом и диэлектриком: в металле

$\text{Im } \varepsilon(\omega) \sim \omega^{-1}$, а в диэлектрике $\text{Im } \varepsilon(\omega) = 0$ при $\omega = 0$. В нашем случае $\text{Im } \varepsilon(\omega)$ при $\omega = 0$ имеет конечный разрыв ($\text{Im } \varepsilon(\omega) = -\text{Im } \varepsilon(-\omega)$).

Следует отметить, что полученные выше формулы, вообще говоря, не справедливы в области малых частот, ввиду того, что все рассмотрение несправедливо вблизи центра псевдощели в смысле первого из условий (2.23), когда $\varepsilon \sim \frac{2}{\gamma} \sim 0$. Поэтому проведенное вычисление поляризационного оператора справедливо, очевидно, лишь в области достаточно высоких частот:

$$\omega \gg v_F \lambda = v_F / R_c \quad (2.84)$$

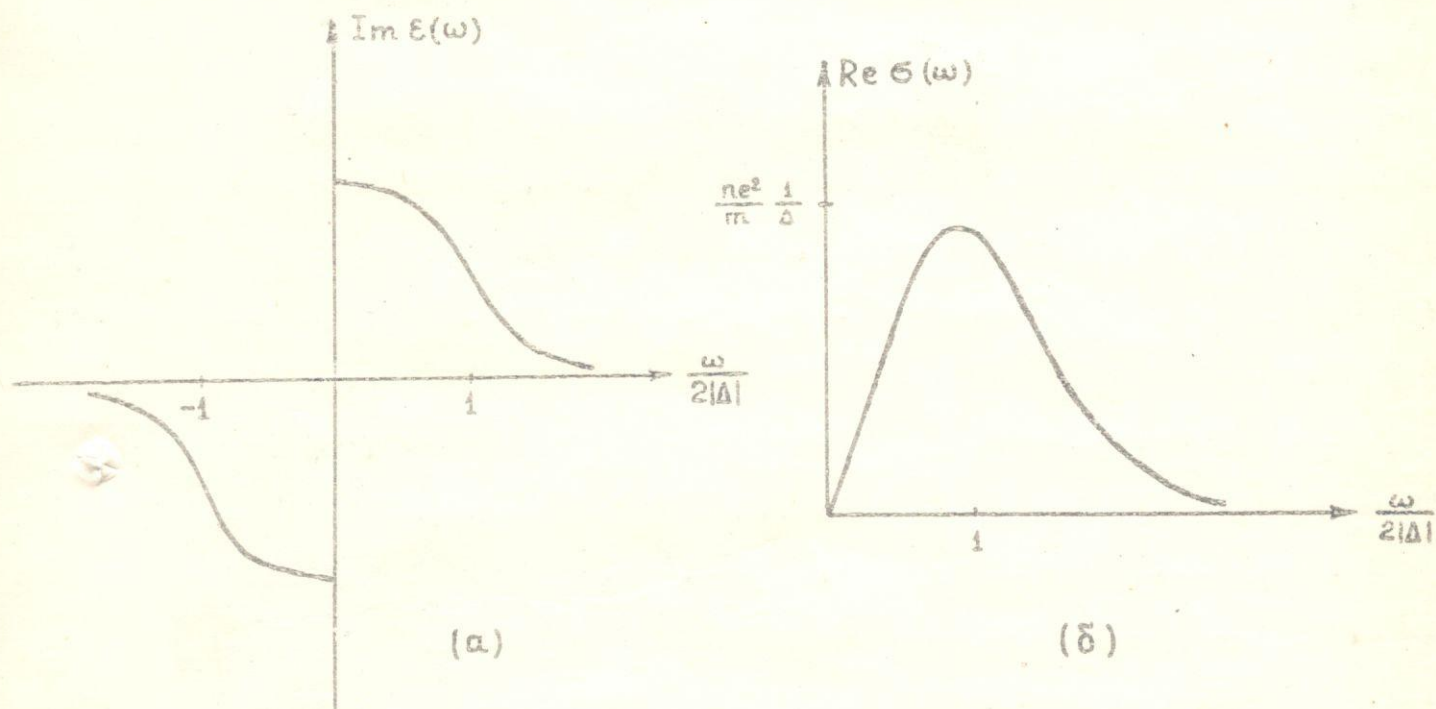


Рис. 12. Поведение мнимой части диэлектрической проницаемости/а/и электромагнитного поглощения/б/как функции частоты внешнего поля.

где χ и R_c определены в (2.23). При $R_c \geq 20a$ речь идет о частотах больше или порядка 0.1-0.2 от ширины псевдо-щели. Условие (2.84) имеет ясный смысл - за характерное время изменения внешнего поля электрон перемещается на расстояние меньше R_c . Истинное поведение в области малых частот определяется диссипативным рассеянием, которое не учитывается в используемых приближениях. Естественно, что учет конечной температуры также изменит асимптотическое поведение $\varepsilon(q, \omega)$ при малых q и ω за счет появления возбужденных носителей в "верхней зоне" *). Поэтому полученные выше предельные формулы полезны только как иллюстрация тенденций к промежуточному между типичными металлами и полупроводниками поведению рассматриваемой модельной системы. Наблюдение пика "мекзонного" поглощения в жидких полупроводниках могло бы представить большой интерес, однако следует иметь в виду, что это поглощение будет (при температурах, типичных для этих расплавов) сильно маскироваться друдевским поглощением на "свободных" носителях, возбужденных в "верхнюю зону". В настоящее время оптические данные по жидким полупроводникам отсутствуют, что обусловлено, по-видимому, экспериментальными трудностями.

§5. Переход полупроводник - металл [52].

Итог предыдущего рассмотрения состоит в ведении эффективного взаимодействия $\frac{4\pi^2}{K^2\Omega_0} \Delta^2 \delta(q-K) \delta(\cos\theta+1)$, которое играет в рассматриваемой модели неупорядоченной системы роль, аналогичную брэгговскому рассеянию в идеальном кристалле. Как

*) В частности это приведет к обычной дебаевской экранировке в миру концентрации возбужденных носителей.

Показано выше это эквивалентно введению периодического случайного поля, амплитуда и фаза которого являются случайными величинами, с распределениями специального вида (см. (2.36)). Тогда основной результат (2.28), (2.30) получается при решении системы уравнений для функций Грина идеального полупроводника типа экситонного изолятора [75, 76], графически изображенной на рис.13, с последующим усреднением по флуктуациям амплитуды и фазы случайного поля. В самом деле, имеем (рис.13): *)

$$G_W(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p) + G_0(i\varepsilon_n p) W e^{-i\varphi} F_W(i\varepsilon_n p) \quad (2.85)$$

$$F_W(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p - \kappa) W e^{i\varphi} G_W(i\varepsilon_n p)$$

Отсюда:

$$G_W(i\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - W^2} \quad (2.86)$$

$$F_W(i\varepsilon_n p) = \frac{W e^{i\varphi}}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - W^2}$$

(ср. (2.29), (2.54)). Тогда, используя распределение Рэлея (2.31) и учитывая, что фазы распределены однородно в интервале $(0, 2\pi)$ (см. (2.36)), получаем (2.30). Средняя аномальная функция Грина, как отмечалось, обращается в нуль.

Перейдем к учету диссипативного рассеяния (2.45). Тогда

*) Фактически рассматривается матричная функция Грина:

$$\begin{bmatrix} G_W(p, p) & G_W(p, p - \kappa) \\ G_W(p - \kappa, p) & G_W(p - \kappa, p - \kappa) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_W(p) & F_W(p) \\ F_W^*(p) & G_W(p - \kappa) \end{bmatrix}$$

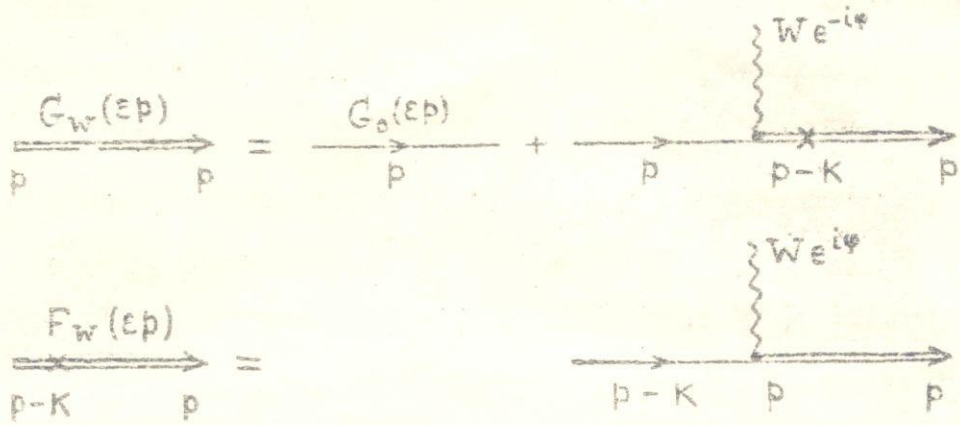


Рис.13. Графическое представление системы уравнений для функции Грина идеального полупроводника.

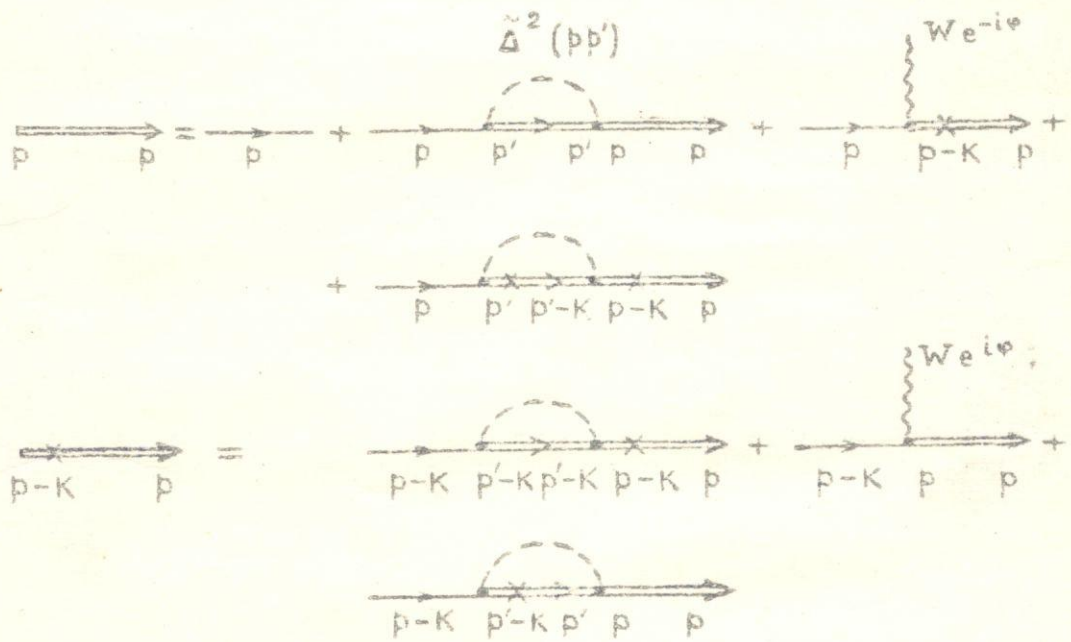


Рис.14. Система уравнений для полупроводника при наличии некогерентного механизма рассеяния.

в простейшем самосогласованном приближении по (2.45) (2.85) переходит в систему уравнений, аналогичную системе для экситонного изолятора с примесями [78], графически представленную на рис. 14:

$$G_W(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p) + G_0(i\varepsilon_n p) \sum (i\varepsilon_n p p) G_W(i\varepsilon_n p) + \\ + G_0(i\varepsilon_n p) W e^{-i\varphi} F_W(i\varepsilon_n p) + G_0(i\varepsilon_n p) \sum (i\varepsilon_n p p - K) F_W(i\varepsilon_n p) \quad (2.87)$$

$$F_W(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p - K) \sum (i\varepsilon_n p - K p - K) F_W(i\varepsilon_n p) + \\ + G_0(i\varepsilon_n p - K) W e^{i\varphi} G_W(i\varepsilon_n p) + G_0(i\varepsilon_n p - K) \sum (i\varepsilon_n p - K) G_W(i\varepsilon_n p)$$

где

$$\sum (i\varepsilon_n p p) = \Omega_0 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \tilde{\Delta}^2(p p') G_W(i\varepsilon_n p') \quad (2.88)$$

$$\sum (i\varepsilon_n p - K p) = \Omega_0 \int \frac{d^3 p'}{(2\pi)^3} \tilde{\Delta}^2(p p') F_W(i\varepsilon_n p') = \sum^* (i\varepsilon_n p p - K)$$

Решение этой системы уравнений имеет вид:

$$G_W(i\varepsilon_n p) = \frac{i\tilde{\varepsilon}_n(p) + \frac{3}{2}p}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p))^2 - \frac{3}{2}p^2 - |\tilde{W}_n(p)|^2} \quad (2.89)$$

$$F_W(i\varepsilon_n p) = \frac{\tilde{W}_n(p)}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p))^2 - \frac{3}{2}p^2 - |\tilde{W}_n(p)|^2}$$

где

$$i\tilde{\varepsilon}_n(p) = i\varepsilon_n - \sum (i\varepsilon_n p p) \quad (2.90)$$

$$\tilde{W}_n(p) = W + \sum (i\varepsilon_n p - K p)$$

Если воспользоваться определением (2.45), то получим:

$$\begin{aligned} \sum (i\varepsilon_n p p) &= \Omega_0 \int \frac{dq}{4\pi^2} q^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta |K_{p+q}|^2 |V/p\rangle^2 S(q) \times \\ &\times \frac{i\tilde{\varepsilon}_n(p+q) + \xi_{p+q}}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p+q))^2 - \xi_{p+q}^2 - |\tilde{W}_n(p+q)|^2} - \Delta^2 \frac{i\tilde{\varepsilon}_n(p-k) - \xi_p}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p-k))^2 - \xi_{p-k}^2 - |\tilde{W}_n(p-k)|^2} \quad (2.9I) \\ \sum (i\varepsilon_n p - K p) &= \Omega_0 \int \frac{dq}{4\pi^2} q^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta |K_{p+q}|^2 |V/p\rangle^2 S(q) \times \\ &\times \frac{\tilde{W}_n(p+q)}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p+q))^2 - \xi_{p+q}^2 - |\tilde{W}_n(p+q)|^2} - \frac{\tilde{W}_n(p-k)}{(i\tilde{\varepsilon}_n(p-k))^2 - \xi_p^2 - |\tilde{W}_n(p-k)|^2} \end{aligned}$$

Переход к модельной неупорядоченной системе осуществляется усреднением (2.89) по флуктуациям амплитуды и фазы когерентного поля, аналогично тому, как это предельвалось выше.

Легко видеть, что уравнения (2.89)-(2.9I) построены таким образом, что они учитывают именно ту часть реального взаимодействия, вкладом которой до сих пор пренебрегалось (диссипативное рассеяние): если при вычислении интегралов в (2.9I) воспользоваться приближением бесконечно узкого пика структурного фактора и доминирующей роли рассеяния назад, то (2.9I) обратятся в нуль и воспроизведутся прежние результаты ^{*)}.

Качественный анализ невозможен без упрощающих предположений.

^{*)} В одномерной модели уравнения типа (2.9I) дают:

$$\begin{aligned} \sum (i\varepsilon_n p p) &\sim O\left(\frac{1}{R_c}\right) \rightarrow 0 \\ \sum (i\varepsilon_n p - K p) &\sim O\left(\frac{1}{R_c}\right) \rightarrow 0 \end{aligned} \quad \text{при } \alpha = \frac{1}{R_c} \rightarrow 0$$

Заметим, что угловая зависимость матричного элемента псевдопотенциала целиком обусловлена его нелокальностью. Между тем всегда можно выделить локальную часть псевдопотенциала, так что (2.45) представляется в виде

$$\tilde{\Delta}(pp') = |V_q|^2 S(q) - \delta \tilde{\Delta}^2(pp') \quad (2.92)$$

$p' = p + q$

где V_q - упомянутая локальная часть псевдопотенциала (например, в приближении на сфере Ферми [42], зависящая только от $|q|$ тогда как $\delta \tilde{\Delta}^2(pp')$ мала в той мере, в какой нелокальность хорошо аппроксимируется предположением о выделенной роли рассеяния назад: $\delta \tilde{\Delta}^2(pp') \rightarrow 0$ при $\kappa \rightarrow 0$ и $|\delta\theta| \rightarrow 0$, где κ - ширина пика структурного фактора, $|\delta\theta|$ - ширина пика в угловой зависимости псевдопотенциала при $\theta \sim \pi$. Выделенная в (2.92) локальная часть, вообще говоря, не мала и должна была бы учитываться с самого начала. Однако, как отмечалось выше, на основании работ [46-49] можно заключить, что она не приводит к существенным поправкам к плотности состояний по сравнению со случаем свободных электронов. Поэтому наше рассмотрение было направлено на выделение аналога брэгговского рассеяния в идеальном кристалле, играющего роль "зонно-формирующего" взаимодействия, что и было сделано в §3.

Рассмотрим теперь влияние рассеяния на локальной части псевдопотенциала на картину плотности состояний, полученную выше. При этом пренебрегаем вторым членом в (2.92), считая, что весь эффект нелокальности сводится к созданию острого пика псевдопотенциала, соответствующего рассеянию назад. Наконец, для дальнейшего упрощения будем считать $|V_q|^2 S(q)$

достаточно гладкой функцией $|q|$, компенсируя пик $S(q)$ малостью $|V_q|^2$ при $|q| \sim 2p_F$, тогда как малость $S(q)$ при $|q| < 2p_F$ компенсируется большой величиной псевдопотенциала в этой области [42] *).

Используя $\tilde{\Delta}^2(p, p') \cong |V_q|^2 S(q)$ в (2.28), получаем аналогично [78]:

$$\begin{aligned} \sum (i\varepsilon_n p) &\approx -\frac{\Gamma}{2} \frac{i\tilde{\varepsilon}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{W}_n|^2}} \\ \sum (i\varepsilon_n p - Kp) &\approx -\frac{\Gamma}{2} \frac{\tilde{W}_n}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_n^2 + |\tilde{W}_n|^2}} \end{aligned} \quad (2.93)$$

Здесь

$$\Gamma = \Omega_0 \frac{m p_F}{2\pi} \int_{-1}^1 d\cos\theta \langle p|V|p' \rangle^2 S(p-p') \Big|_{|p|=|p'|=p_F} \quad (2.94)$$

что имеет смысл обратного времени рассеяния электрона с поверхности Ферми на локальном псевдопотенциале $\langle p|V|p' \rangle \equiv \equiv V_{|q|, |p'=p+q|}$. Отсюда имеем:

$$\tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + \frac{\Gamma}{2} \frac{u_n}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \quad (2.95)$$

$$\tilde{W}_n = W - \frac{\Gamma}{2} \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}}$$

где $u_n = \frac{\tilde{\varepsilon}_n}{\tilde{W}_n}$ определяется уравнением:

*) Это предположение не противоречит предыдущему рассмотрению, так как нам существенен острый пик по $|q|$ в зависящей от угла θ нелокальной части реального взаимодействия $\langle p+q|V|p \rangle^2 S(q)$. Нелокальность существенна только при больших $|q| \sim 2p_F$ [42].

$$\frac{\varepsilon_n}{W} = u_n \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{W} \frac{1}{\sqrt{u_n^2 + 1}} \right\} \quad (2.96)$$

как функция $\frac{\varepsilon_n}{W}$ и $\frac{\Gamma}{W}$. Таким образом, наше рассмотрение системы уравнений (2.87)-(2.91) с используемыми упрощениями аналогично задаче о влиянии магнитных примесей на сверхпроводимость [79] или обычных примесей на экситонный изолятор [78]. Одноэлектронная плотность состояний при фиксированном W получается обычным образом из (2.89) после аналитического продолжения $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon + i\delta$:

$$\begin{aligned} \frac{N_W(\varepsilon)}{N_0} &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{z}_p \operatorname{Im} \frac{\tilde{\varepsilon} + \tilde{z}_p}{\tilde{\varepsilon}^2 - \tilde{z}_p^2 - |W|^2} = \\ &= \operatorname{Im} \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \end{aligned} \quad (2.97)$$

где u определяется аналитическим продолжением (2.96)

$$\frac{\varepsilon}{W} = u \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{W} \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \right\} \quad (2.98)$$

Тогда плотность состояний в жидком полупроводнике есть:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \frac{2}{\Delta^2} \int_0^{\infty} dW W e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}} \operatorname{Im} \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \quad (2.99)$$

При $\frac{\Gamma}{|\Delta|} \rightarrow 0$ (2.99) переходит в (2.39). При конечных (2.99) описывает плотность состояний с псевдощелью (шириной $\sim 2/|\Delta|$), причем в отличие от (2.39) плотность состояний отлична от нуля и на уровне Ферми (в центре псевдощели). При этом получаем:

$$g = \frac{N(0)}{N_0} = \frac{|\Delta|}{\Gamma} \int_0^{\Gamma^2/\Delta^2} dz e^{-z} \sqrt{\frac{\Gamma^2}{\Delta^2} - z} =$$

$$= \frac{2|\Delta|}{\Gamma} \exp\left\{-\frac{\Gamma^2}{\Delta^2}\right\} \frac{d}{d\alpha} \operatorname{Erfi} \alpha^{1/2} \frac{\Gamma}{|\Delta|} \Big|_{\alpha=1} \quad (2.100)$$

При $\frac{\Gamma}{|\Delta|} \ll 1$ имеем: $g \approx \frac{2}{3} \left(\frac{\Gamma}{|\Delta|}\right)^2$

При $\frac{\Gamma}{|\Delta|} \gg 1$ $g \rightarrow 1$, т.е. при $\Gamma \sim |\Delta|$ происходит заполнение псевдощели, и система переходит в "металлическое" состояние [17, 18]. Качественно поведение g представлено на рис.15. Поскольку Γ является, вообще говоря, растущей функцией температуры (из-за соответствующей зависимости структурного фактора [1, 3]), переход полупроводник - металл происходит с ростом температуры.

Заметим, что (2.97) описывает плотность состояний со щелью $E_g = |W| \left\{1 - \left(\frac{\Gamma}{W}\right)^{2/3}\right\}^{3/2}$ при $\Gamma < |W|$ и бесщелевой случай при $\Gamma \geq |W|$ [78, 79]. Поэтому (2.99) фактически описывает ансамбль, частично состоящий из "металлических" областей с нулевой щелью, причем их доля в ансамбле конечна и пропорциональна фактору g . Качественно g можно придавать смысл части объема, занятой "металлическими" областями, тогда как $1 - g$ соответствует части объема, занятой "полупроводниковыми" областями [59]. Поэтому рассматриваемая модель может служить микроскопической основой для описания кинетических явлений с помощью идей теории "протекания" (percolation) [57-59]. При $g < g_c$, где g_c - некоторое критическое значение, объем жидкости состоит, в основном, из полупроводниковых областей и изолированных металлических островков - электроны локализованы из-за "брегговского" рассеяния. При $g = g_c$ появляется

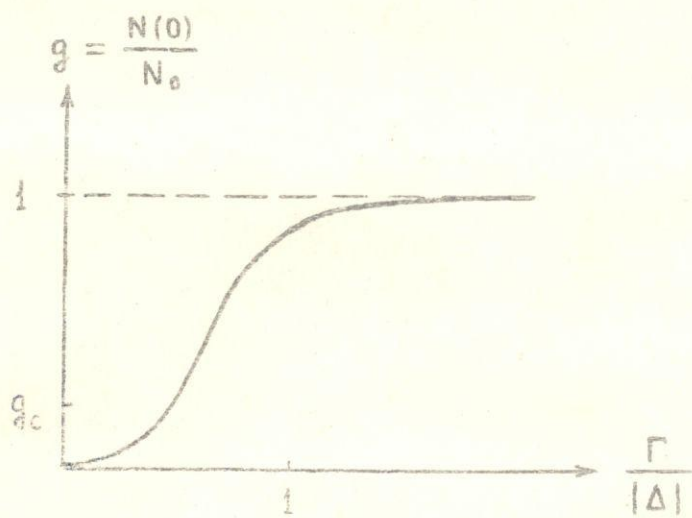


Рис.15. Плотность состояний на уровне Ферми.
Заполнение псевдошели при росте Γ .

первый непрерывный путь через весь образец, проходящий целиком в металлической области. При $g > g_c$ весь объем заполняется такими металлическими областями и при $g \rightarrow 1$ система становится металлом. При $g > g_c$ проводимость определяется, главным образом, металлическими областями — электроны делокализованы. Критическое g_c по различным оценкам [58, 59] заключено в пределах $0.15 \leq g_c \leq 0.5$. Наиболее типично $g_c \approx 0.2$. Тогда из нашего рассмотрения следует, что делокализация электронов и переход к металлической проводимости происходит при $\frac{\Gamma}{|\Delta|} \approx 0.5$.

Таким образом, диссипативное рассеяние приводит в нашей модели к возможности описания перехода "жидкого полупроводника" в металлическое состояние и существенно образом определяет кинетические свойства системы. Уравнения (2.89)–(2.91) могут служить основой для численных расчетов с использованием модельных псевдопотенциалов и реалистических структурных факторов. При таком подходе рассмотренная выше модель жидких полупроводников может оказаться полезной при рассмотрении свойств реальных систем (например, расплавов группы В).

Г л а в а Ш

КВАЗИОДНОМЕРНЫЕ СИСТЕМЫ, ИСПЫТЫВАЮЩИЕ ПАЙЕРЛСОВСКИЙ
СТРУКТУРНЫЙ ПЕРЕХОД. ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ

В течение длительного времени исследование физических свойств одномерных систем привлекало внимание теоретиков ввиду возможности получения в ряде случаев точных аналитических решений, позволявших проверить представления, сформировавшиеся в результате использования приближенных методов для описания реальных трехмерных систем [80]. Предложение Литтла о возможности высокотемпературной сверхпроводимости в одномерной полимерной цепочке [81] стимулировало как дальнейшие теоретические исследования, так и экспериментальный поиск квазиодномерных систем. Это привело в настоящее время к синтезу и исследованию целого ряда физических свойств хорошо проводящих квазиодномерных кристаллов на основе солей $TCNQ$ и плоскоквадратных комплексов переходных элементов группы платины [82, 83]. Особый интерес вызывает экспериментальное наблюдение пайерлсовского структурного перехода в комплексе $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ [83], также как возможность "гигантской" проводимости, ассоциируемой с этим переходом, в соли $TTF-TCNQ$ [84]. Представляется несомненным, что квазиодномерные системы обладают целым рядом специфических свойств, и их исследование уже сейчас может считаться новым направлением физики твердого тела.

§I. Экспериментальные исследования.

Мы остановимся на исследованиях соединений, в которых непосредственно наблюдается или, на основании целого ряда косвенных данных, предполагается пайерлсовский структурный переход. Качественные соображения Пайерлса о неустойчивости одномерной электронной системы относительно изменения периода решетки, переводящего металлическую систему в диэлектрическое состояние (щель в спектре электронов на уровне Ферми) хорошо известны [85]. Согласно этим представлениям, при понижении температуры в исходной кристаллической решетке под влиянием электронной подсистемы должны появиться смещения атомов, соответствующие деформации с волновым вектором $2p_F$ (p_F - фермиевский импульс электронов), так что возникает сверхструктура с новым периодом, которая и приводит (из-за обычного брэгговского рассеяния) к образованию энергетической щели на уровне Ферми. В частности, для наполовину заполненной исходной зоны (один электрон на атом) происходит удвоение периода, т.е. объем исходной зоны Бриллюэна уменьшается вдвое, что и приводит к диэлектризации системы (см. рис. I6). Деформация электронного спектра для этого случая показана на рис. I7. Элементарная теория пайерлсовского перехода рассматривается в §2 этой главы.

Наиболее хорошо исследованным соединением, где, по-видимому, происходит пайерлсовский структурный переход, является платиновый комплекс $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ [82, 83]. Характерной особенностью структуры этого соединения является на-

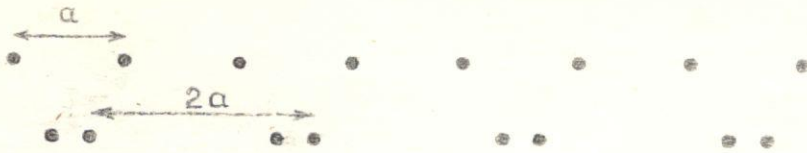


Рис. 16. Пайерлсовское удвоение периода:

- а. исходная цепочка атомов $T > T_p$ /-период a .
- б. цепочка после пайерлсовского перехода $T < T_p$ /-период $2a$.

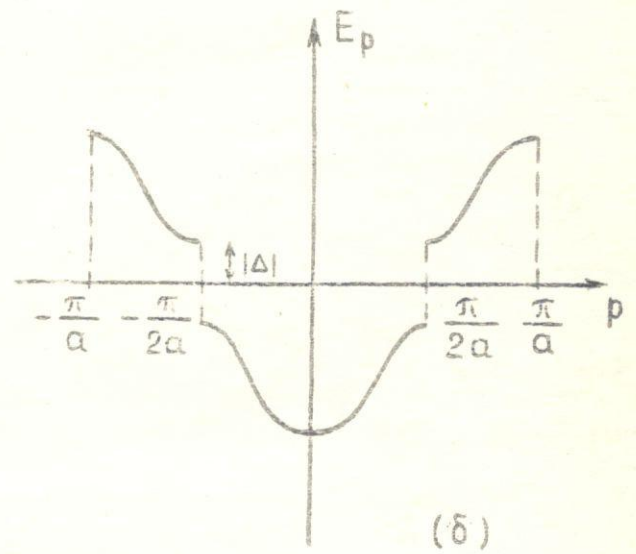
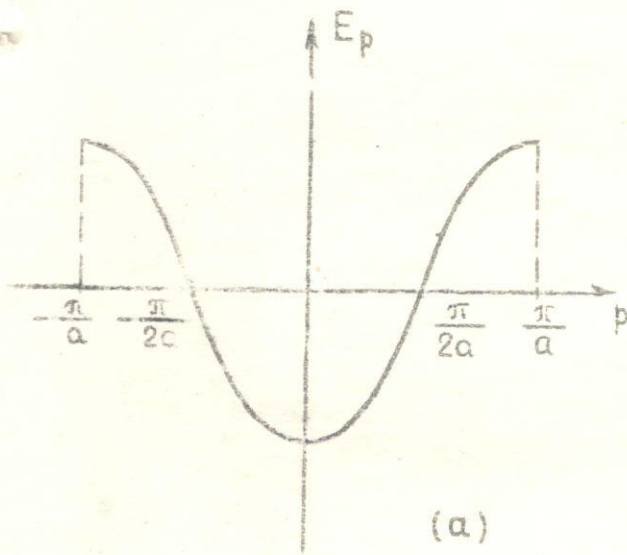


Рис. 17. Деформация электронного спектра при пайерлсовском удвоении периода:

- а. спектр при $T > T_p$ - металл
- б. спектр при $T < T_p$ - диэлектрик.

личие в нем "стопок" из плоско-квадратных комплексов, содержащих в центре атом Pt и CN - группы по углам (см. рис. 18). Атомы Pt в такой системе расположены на расстоянии 2.88 \AA друг от друга, что только слегка больше расстояния $Pt - Pt$ в металлической платине (2.77 \AA). Наблюдается сильная анизотропия проводимости: проводимость вдоль цепочек Pt в $10^4 - 10^5$ раз больше, чем перпендикулярно к цепочкам, что указывает на квазиодномерный характер движения носителей вдоль цепочек. При этом абсолютная величина проводимости при комнатной температуре $\sigma_{RT} \sim 10^2 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$. В области температур порядка комнатной проводимость падает с ростом температуры, что казалось бы свидетельствует о ее металлическом характере. Однако при понижении температуры она достигает размытого максимума и затем довольно медленно падает с дальнейшим понижением температуры [82, 83]. О металлических свойствах носителей при высоких температурах свидетельствуют также оптические данные [83]. Происхождение этих металлических свойств нетрудно понять. $K_2Pt(CN)_4$ является диэлектриком, в которой последняя заполненная зона образуется перекрытием d_{z^2} орбиталей атомов Pt , ориентированных параллельно цепочкам. Добавление сильных акцепторов (типа Br) частично опустошает d_{z^2} зону, что приводит к образованию одномерного "металла". Поскольку каждый атом платины дает два электрона в зону d_{z^2} , а каждый атом Br захватывает один электрон, ожидается, что металлическая зона в $K_2Pt(CN)_4 Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ будет заполнена на $5/6$ своего объема. На языке дырок мы имеем зону, заполненную на $1/6$. В соответствии с соображениями Пайерлса, такое заполнение исходной зоны вызовет при понижении темпера-

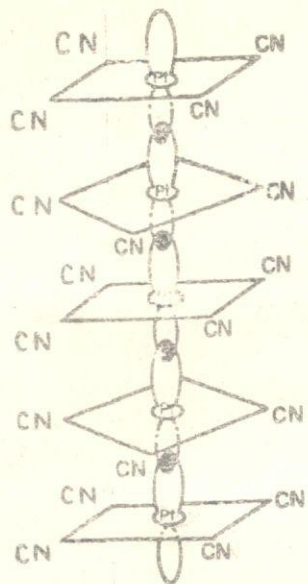


Рис. 18. "Одномерная" структура

соединения $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$

Показано перекрытие d_{z^2} орбиталей Pt.

Атомы K, Br и молекулы H_2O не показаны.

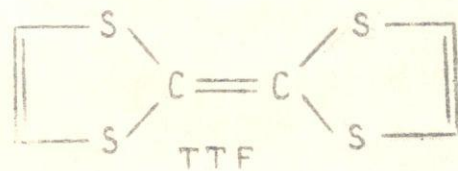
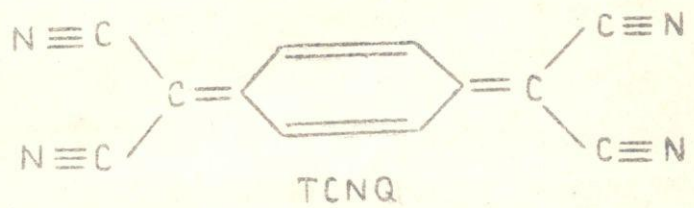
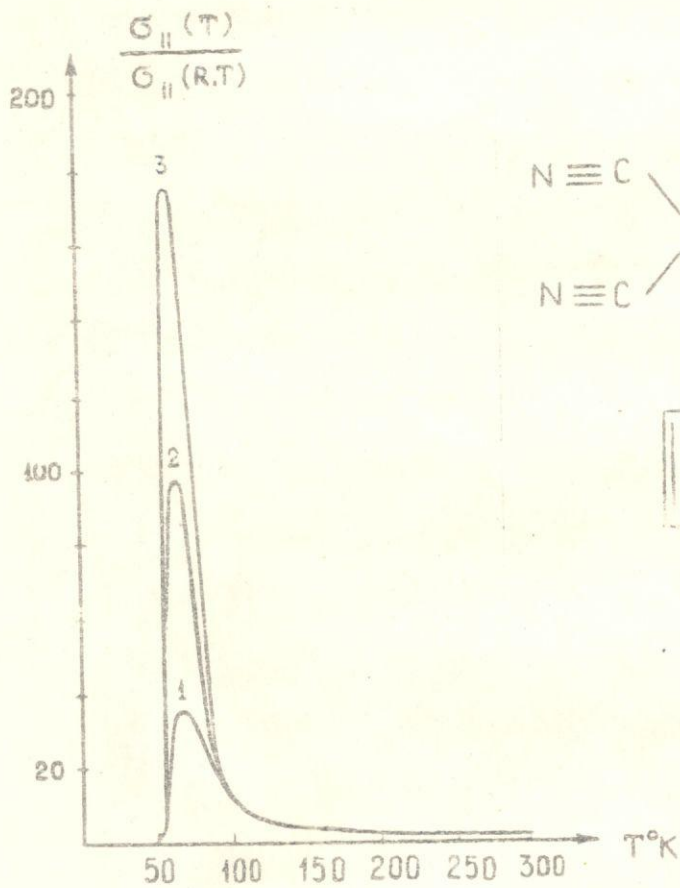


Рис. 19. Температурная зависимость электропроводности

вдоль цепочек TTF-TCNQ.

1-типичные образцы

2,3-рекордные образцы.

туры уместерение периода исходной цепочки атомов Pt . Исследования с помощью диффузного рассеяния рентгеновских лучей [86, 87] и как неупругого, так и упругого рассеяния нейтронов [88, 89] показывают, что соответствующая сверхструктура в цепочках атомов Pt действительно наблюдается. При этом неупругое рассеяние нейтронов [88] показало сильное смягчение фононной моды с импульсом $q \approx 2p_F$, которое, по-видимому, предшествует пайерлсовской неустойчивости (см. ниже §2). Следует подчеркнуть, что сверхструктура и мягкая мода в отдельных цепочках существуют, согласно [86-89], даже при комнатных температурах. При понижении температуры, в области $T \sim 100-120^\circ K$ начинается корреляция смещений атомов в соседних цепочках [87, 89], которая, тем не менее, не приводит к трехмерному упорядочению в системе вплоть до самых низких температур (измерения проводились до $6^\circ K$) [89]. К сожалению, существующие эксперименты пока еще не в состоянии ответить на вопрос, является наблюдаемая в отдельной цепочке сверхструктура статической или динамической (соответствующей существованию в системе очень мягкой фононной моды с $q \approx 2p_F$), т.е. существует ли уже при комнатной температуре истинное пайерлсовское искажение решетки или же в системе наблюдаются мощные корреляции ближнего порядка - предвестники пайерлсовского перехода. Во всяком случае в работах [86, 89] показано, что радиус корреляции пайерлсовской сверхструктуры значительно превышает расстояние $Pt-Pt$. Так по данным [86] соответствующая длина $\xi > 140a$ (a - расстояние $Pt-Pt$), а по [89] $\xi > 20a$ даже при комнатной температуре. Ответ на вопрос о

статическом или динамическом характере сверхструктуры в $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ должны дать тщательные измерения температурного поведения мягкой моды, которые еще не проведены.

Отметим еще одну важную особенность соединений типа $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$: атомы K и Br расположены в них неупорядоченным образом, так как они занимают соответственно только $1/2$ и $1/3$ доступных для них мест в кристалле. Таким образом, этой системе внутренне присущ беспорядок, который может весьма существенно сказываться на ее свойствах как в смысле кинетики носителей, так и в смысле возможности пайерлсовского перехода.

Соединение $TTF-TCNQ$ привлекло внимание, главным образом, в связи с сообщением о наблюдении "гигантского" пика проводимости на пороге перехода в диэлектрическое состояние при $T \approx 60^\circ K$ [84]. Это соединение состоит из молекул $TCNQ$ (тетрацианхинодиметан) и TTF (тетратифулалин), структурные формулы которых даны на рис. 18. Монокристаллы $TTF-TCNQ$ состоят из параллельных "стопок" $TCNQ$ и TTF , причем молекула $TCNQ$ является акцептором электронов TTF . Обычно принято считать, что одна молекула $TCNQ$ принимает один электрон TTF , так что цепочка $TCNQ$ становится одномерным металлом с наполовину заполненной зоной. Заметим, что существование двух типов цепочек, также как неполный переход заряда с TTF на $TCNQ$, могут усложнить это простое рассмотрение. $TTF-TCNQ$ является квазиодномерным проводником: анизотропия электропроводности того же порядка, что и в платиновых комплексах. $TTF-TCNQ$

обладает рекордной для квазиодномерных проводимостью при комнатной температуре: на лучших образцах $\sigma_{RT} \approx 10^3 \text{ ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ [84]. Возможно, что это связано с отсутствием в $TTF\text{-}TCNQ$ внутреннего беспорядка, присущего другим соединениям $TCNQ$ [82, 83] и платиновым комплексам [83].

Температурная зависимость проводимости вдоль цепочек в $TTF\text{-}TCNQ$ приведена на рис.19 согласно данным работ [84, 90]. Наблюдается резкий максимум проводимости при $T \approx 60^\circ\text{K}$, причем в [84] приводились данные по образцам с $\frac{\sigma(\text{Max})}{\sigma_{RT}} \approx 500$, а в [90] с $\frac{\sigma(\text{Max})}{\sigma_{RT}} \approx 150$. Для подавляющего большинства образцов $\frac{\sigma(\text{Max})}{\sigma_{RT}} \approx 15\text{-}30$ [84, 90, 91]. При понижении температуры система претерпевает переход в диэлектрическое состояние, который в работе [84] интерпретировался как переход, связанный с пайерлсовской неустойчивостью, тогда как гигантский пик проводимости приписывался флуктуационному БКШ-спариванию, что активизировало интерес к проблеме высокотемпературной проводимости в квазиодномерных системах. Реальность гигантского пика проводимости, наблюдавшегося в [84], была подвергнута сомнению в [92], однако в работе [90] группа Гарито-Хигера подтверждает свои прежние результаты с учетом критики четырехконтактного метода измерений в [92]. Измерения проводимости в СВЧ диапазоне [93, 94] не дают прямых подтверждений существования гигантской проводимости, однако авторы работы [94] считают, что обычная интерпретация этих измерений может дать лишь нижнюю границу проводимости, ввиду малой глубины проникновения СВЧ поля в хорошо проводящих образцах.

Оптические измерения на $TTF\text{-}TCNQ$ [95, 96] подтверждают, что эта соль является при высоких температурах квазиодномер-

ным металлом.

Следует заметить, что согласно [96] даже типичные максимумы проводимости (возрастание в 15/30 раз при $T \approx 60^\circ\text{K}$) вряд ли могут быть интерпретированы в рамках картины одночастичной проводимости.

Отметим, что СВЧ измерения [93, 94] приводят к очень большим значениям диэлектрической проницаемости вдоль "металлических" линий: $\epsilon \approx 10^3$.

Изучение перехода металл - диэлектрик в $TTF-TCNQ$ под давлением [97], по-видимому, соответствует интерпретации этого перехода согласно пайерлсовской модели. Однако до сих пор отсутствуют прямые экспериментальные свидетельства в пользу существования пайерлсовской сверхструктуры в $TTF-TCNQ$, подобные обсуждавшимся выше для платиновых комплексов. Нейтронографические исследования структуры и фононных спектров $TTF-TCNQ$ не проводились. В то же время первые данные по диффузному рассеянию рентгеновских лучей [98] не указывают на какой-либо структурный фазовый переход в интервале температур от комнатной до нескольких градусов Кельвина. Поэтому существование пайерлсовского структурного перехода в $TTF-TCNQ$ при $T \approx 60^\circ\text{K}$ нельзя считать доказанным. Нельзя однако отрицать возможность того, что пайерлсовская сверхструктура может существовать в отдельных нитях и при комнатных температурах, хотя бы в виде флуктуаций с большим радиусом корреляции, тогда как при $T \approx 60^\circ\text{K}$ в системе происходит либо трехмерное упорядочение, либо переход металл - диэлектрик, не связанный со структурными изменениями.

Отметим, что в работе [99] сообщается о наблюдении в

$TTF-TcNQ$ особенности теплоемкости при $T \approx 54^{\circ}K$, которая может быть связана с фазовым переходом.

§2. Теоретические модели.

Теория пайерлсовского перехода в приближении самосогласованного поля хорошо известна [100, 101]. В последнее время она достаточно подробно рассматривалась в работах [102, 103]. Теория строится в близкой аналогии с БКШ теорией сверхпроводимости, хотя, ест естественно, имеются и довольно существенные различия. Ниже в этом параграфе мы сформулируем основные уравнения и результаты этой теории для простейшего случая наполовину заполненной исходной зоны (удвоение периода), когда деформация решетки не сопровождается перераспределением электронного заряда [104].

Гамильтониан системы запишем в виде:

$$H = H_e + H_p + H_{ep} \quad (3.1)$$

где

$$H_e = \sum_p \xi_p a_p^+ a_p \quad (3.2)$$

$$H_p = \sum_q \omega_q b_q^+ b_q \quad (3.3)$$

описывают "свободные" электроны и фононы, причем электронный спектр исходной зоны ξ_p имеет вид:

$$\xi_p = -\epsilon_F \cos pa \quad (3.4)$$

где a - расстояние между узлами одномерной цепочки (3.4) соответствует рассмотрению зоны в приближении сильной связи. Уровень Ферми проходит посередине зоны, как на рис. 17(а). Энергия Ферми $\epsilon_F = 2J$, где J - интеграл перекрытия волновых функций соседних узлов. Импульс Ферми $p_F = \frac{\pi}{2a}$. Фононный спектр можно считать акустическим $\omega_q = sq$, где s - скорость звука.

Гамильтониан электрон-фононного взаимодействия записывается в виде (гамильтониан Фрелиха):

$$H_{ep} = \sum_{pq} g(q) a_{p+q}^{\dagger} a_p (b_q + b_{-q}^{\dagger}) \quad (3.5)$$

где $g(q)$ - константа электрон-фононного взаимодействия. Возникновение пайерлсовской сверхструктуры описывается введением аномального среднего:

$$\Delta = g(2p_F) \langle b_{2p_F} + b_{-2p_F}^{\dagger} \rangle \neq 0 \quad (3.6)$$

где угловые скобки означают статистическое среднее. Возникновение аномального среднего вида (3.6) можно интерпретировать как бозе-конденсацию фононов с квазиимпульсом $q = 2p_F$ [105]. В координатном представлении (3.6) описывает потенциальное поле волны пайерлсовской деформации:

$$\psi(x) = \Delta e^{i2p_F x} + \Delta^* e^{-i2p_F x} = 2|\Delta| \cos(2p_F x + \varphi) \quad (3.7)$$

где φ - фаза параметра порядка (3.6)

Тогда электронный спектр определяется системой уравнений типа Рис.13, имеющей в данном случае вид:

$$G(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p) + G_0(i\varepsilon_n p) \Delta F(i\varepsilon_n p) \quad (3.8)$$

$$F(i\varepsilon_n p) = G_0(i\varepsilon_n p - 2p_F) \Delta^* G(i\varepsilon_n p)$$

решение которой с учетом условия (ср. (3.4); $p_F = \frac{\pi}{2a}$)

$$\zeta p - 2p_F = -\zeta p \quad (3.9)$$

имеет вид:

$$G(i\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + \zeta p}{(i\varepsilon_n)^2 - \zeta^2 p^2 - |\Delta|^2} \quad (3.10)$$

$$F(i\varepsilon_n p) = \frac{\Delta^*}{(i\varepsilon_n)^2 - \zeta^2 p^2 - |\Delta|^2}$$

так, что спектр электронных возбуждений в деформированной решетке есть:

$$E_p = \pm \sqrt{\zeta^2 p^2 + |\Delta|^2} \quad (3.11)$$

что и изображено на рис. 17(б).

Соответствующая плотность электронных состояний в окрестности уровня Ферми равна:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta|^2}} & \text{при } |\varepsilon| > |\Delta| \\ 0 & \text{при } |\varepsilon| < |\Delta| \end{cases} \quad (3.12)$$

где N_0 - плотность состояний на уровне Ферми исходной зоны. Графически она представлена на рис. 20.

Рассмотрим термодинамику перехода. Свободная энергия деформированной решетки имеет вид:

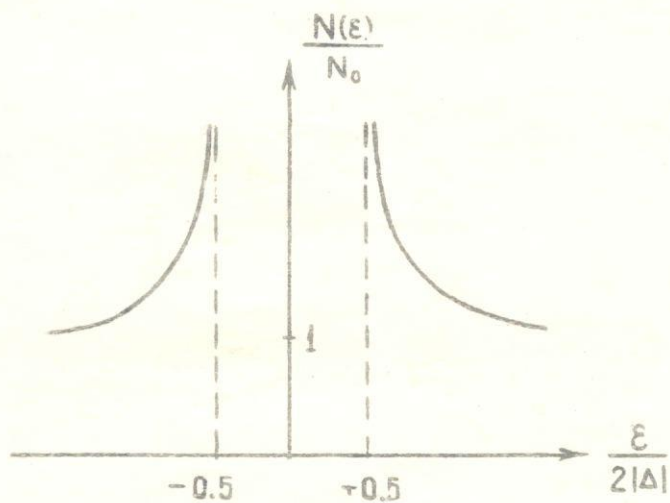


Рис. 20. Плотность электронных состояний в пайерлсовском диэлектрике.

$$F(|\Delta|, T) = -2T \sum_p \ln \left\{ 2ch \frac{E_p}{2T} \right\} + N_0 |\Delta|^2 / \lambda \quad (3.13)$$

где $\lambda = 2N_0 |g(2p_F)|^2 / \omega_{2p_F}$ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия. Первый член в (3.13) представляет собой свободную энергию электронов с законом дисперсии (3.11). Второй член в (3.13) — энергия деформации решетки, соответствующая усреднению (3.3) с учетом (3.6). Равновесное значение параметра $|\Delta|$ определяется из условия экстремальности свободной энергии:

$$\frac{\partial F(|\Delta|, T)}{\partial |\Delta|} = 0 \quad (3.14)$$

В частности температура перехода определяется как температура, при которой появляется нетривиальное решение уравнения (3.14) $|\Delta| \neq 0$. Переходя в (3.13) от интегрирования по p к интегрированию по z (3.4) и выполняя дифференцирование (3.14), получаем уравнение, определяющее энергетическую щель в электронном спектре:

$$1 = \lambda \int_0^{\epsilon_F} dz \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{z^2}{\epsilon_F^2}}} \frac{th \frac{\sqrt{z^2 + |\Delta|^2}}{2T}}{\sqrt{z^2 + |\Delta|^2}} \quad (3.15)$$

Критическая температура отсюда определяется условием:

$$1 = \lambda \int_0^{\epsilon_F} \frac{dz}{\sqrt{1 - \frac{z^2}{\epsilon_F^2}}} \frac{th \frac{z}{2T_{p0}}}{z} \quad (3.16)$$

что дает [102, 103] ($\ln \gamma = C$ — постоянная Эйлера):

$$T_{p0} = \frac{4\gamma}{\pi} \epsilon_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (3.17)$$

При $T=0$ энергетическая щель определяется из:

$$1 = \lambda \int_0^{\varepsilon_F} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \frac{\xi^2}{\varepsilon_F^2}}} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_0|^2}} \quad (3.18)$$

откуда [102, 103]:

$$|\Delta_0| = 4\varepsilon_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (3.19)$$

так что $\frac{|\Delta_0|}{T_{p0}} = \frac{\pi}{\gamma} \approx 1,76$, что совпадает с соответствующим отношением в теории БКШ.

При $T \leq T_{p0}$ параметр $|\Delta|$ мал, так что в (3.12) можно провести разложение Ландау по степеням $|\Delta|^2$:

$$F(|\Delta|, T) - F(0, T) = a(T) |\Delta|^2 + b |\Delta|^4 + \dots \quad (3.20)$$

где коэффициенты разложения оказываются равными аналогичным значениям теории БКШ [103, 106]:

$$a(T) = N_0 \frac{T - T_{p0}}{T_{p0}} \quad (3.21)$$

$$b = \frac{7\zeta(3) N_0}{16\pi^2 T_{p0}^2}$$

где $\zeta(x)$ — дзета-функция Римана.

Таким образом, мы получили описание пайерлсовского структурного перехода в рамках приближения самосогласованного поля.

Пайерлсовский переход сопровождается существенной перестройкой фононного спектра системы. Соответствующие расчеты в приближении хаотических фаз выполнялись в работах [88,

102, 103, 106]. При $T \geq T_{p0}$ происходит смягчение фононной моды с $q \approx 2p_F$, которая становится неустойчивой при $T = T_{p0}$. При $T < T_{p0}$ фононный спектр стабилизируется, однако теперь в нем возникает оптическая ветвь, соответствующая тому факту, что в перестроенной решетке имеется два атома в элементарной ячейке. Эта ветвь смягчается при $T \leq T_{p0}$, описывая неустойчивость конденсированной фазы при $T = T_{p0}$ [102].

Существенным недостатком изложенной теории является пренебрежение эффектами межэлектронного взаимодействия. Несмотря на ряд попыток последовательного описания этих эффектов, задача весьма далека от решения. Возникающие здесь трудности, такие как и разнообразие эффектов межэлектронного взаимодействия в квазиодномерных системах, видны из соответствующих работ [107-109].

Следует также отметить проблематичность использования модели Фрелиха для описания электрон-фононной системы в металлах, в частности, для рассмотрения неустойчивости решетки. Последовательное рассмотрение должно проводиться в рамках адиабатического приближения Борна-Оппенгеймера [19]. Однако соответствующая программа описания электрон-фононного взаимодействия и вопросов устойчивости решетки в металлах еще не проведена.

При обсуждении экспериментальных данных по квазиодномерным системам отмечалось, что большинству из них (кроме $TTF-TCNQ$) внутренне присуща неупорядоченность структуры. В комплексах типа $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ она обусловлена хаотическим расположением атомов K и Br , в хорошо проводящих солях $TCNQ$ - хаотичным ориентационным расположением асимметричных катионов [82]. Довольно очевидно, что наличие соответствующего случайного

поля должно существенно сказаться на пайерлсовском переходе в таких системах. Действительно, неупорядоченность размывает особенность плотности состояний (3.12), создавая "хвосты" плотности состояний в запрещенной зоне. Кроме того, неупорядоченность вообще должна препятствовать возникновению периодической пайерлсовской сверхструктуры. Ниже, в Главе IV мы рассмотрим влияние неупорядоченности кристаллической решетки на пайерлсовский переход и покажем, что она приводит к сильному подавлению перехода, в качественном отношении аналогичному влиянию магнитных примесей на сверхпроводящий переход [110]. Там же будут обсуждаться возможные экспериментальные следствия.

Проведенное выше рассмотрение пайерлсовского перехода в приближении самосогласованного поля страдает еще одним существенным недостатком. Хорошо известно, что в одномерной системе становятся крайне существенными флуктуации самосогласованного поля, которые вообще делают невозможным существование одномерного упорядочения [111]. Невозможность истинных фазовых переходов в одномерной системе строго доказана [112]. Учет трехмерности реальной системы типа $TTF-TCNQ$ или $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$, представляющей собой трехмерную решетку одномерных нитей, является весьма сложной задачей. С одной стороны ясно, что учет взаимодействия соседних нитей (даже весьма слабого) делает неприменимым строгий результат Хоэнберга [112] и может, вообще говоря, привести к стабилизации истинного перехода. С другой стороны флуктуации могут оказаться весьма существенными и в реальных квазиодномерных системах, о чем может быть непосредственно свидетельствуют обсуждавшиеся выше нейтро-

нографические исследования $K_2 Pt(CN)_4 Br_{0.3} 3H_2O$ [89]. Истинное упорядочение может отсутствовать, но может существовать дальнедействующий ближний порядок, или, наконец, в системе может существовать сравнительно слабое когерентное поле, сопровождающееся мощными некогерентными флуктуациями.

Первая существенная попытка качественного рассмотрения роли флуктуаций в теории пайерлсовского перехода предпринята в работе Ли, Райса и Андерсона [113]. В ней принимается полуфеноменологическая модель перехода, основанная на разложении Ландау для свободной энергии в ряд по флуктуирующему параметру порядка, являющемся непосредственным обобщением разложения / 3.20 / и учитывающим возможность флуктуаций с $q \neq 2p_F$.

Одномерная модель фазовых переходов Ландау детально использовалась в работе [114], где было показано, что хотя в одномерном случае и отсутствует истинный дальний порядок, тем не менее, существуют дальнедействующие флуктуации параметра порядка, причем при некоторой температуре длина корреляций этих флуктуаций экспоненциально возрастает. Эта температура в случае пайерлсовского перехода оказывается согласно [113] равной примерно $0.25 T_{p0}$, где T_{p0} - температура перехода в приближении самосогласованного поля /3.17/. При таком возрастании длины корреляций в реальной квазиодномерной системе, по видимому, станут существенны корреляции между отдельными нитями, и в системе может стабилизироваться трехмерный дальний порядок. Это послужило основным аргументом в пользу утверждения Ли, Райса и Андерсона о том, что температура пайерлсовского перехода в $TTF-TCNQ$ в приближении молекулярного поля составляет, вероятно, сотни градусов Кельвина, тогда как переход при

$T \approx 60^\circ\text{K}$ соответствует трехмерному упорядочению. При $\frac{1}{4} T_{po} < T < T_{po}$ в системе существуют дальнедействующие корреляции ближнего порядка, существенно сказывающиеся на ее электронных свойствах и делающие ее похожей на "жидкий полупроводник". В частности, вместо картины плотности состояний Рис.20 имеем плотность состояний с типичной псевдощелью.

В главе У настоящей диссертации будет рассмотрена модель Ли, Райса и Андерсона для пайерлсовского перехода с использованием методов и приближений, применявшихся выше при анализе модели энергетического спектра жидких полупроводников. При этом мы обобщим рассмотрение работы [113] при анализе энергетического спектра, а также проанализируем диэлектрические и высокочастотные свойства такой модели. Будет также рассмотрена роль флуктуаций в случае стабилизации истинного дальнего порядка [115].

В заключение этой главы кратко рассмотрим имеющиеся попытки интерпретации "гигантского" пика проводимости в $TTF-TCNQ$. Первоначальная трактовка пика, как свидетельства флуктуационного образования куперовских пар [84], была подвергнута критике в работах [116, 117]. Было показано, что механизм спаривания, предложенный в [84], за счет обмена фононами "мягкой" моды на пороге пайерлсовского перехода, вряд ли может быть достаточно эффективным. Бардин [118] предложил интерпретацию на основе так называемого "фрелиховского" механизма сверхпроводимости [100]. Фрелих [100] рассмотрел случай бегущей волны пайерлсовской деформации, т.е. случай, когда фаза этой волны (3.7) становится зависящей от времени. При этом в модели "желе",

не учитывающей структуру исходной решетки, он показал, что такое движение является незатухающим (при не слишком больших скоростях волны) и сопровождается полным увлечением электронов, захваченных волной, т.е. незатухающим электрическим током. При учете структуры исходной решетки оказывается, [103], что такое сверхтекучее движение при $T < T_{p0}$ невозможно, во всяком случае для волны с периодом, соизмеримым с периодом исходной решетки. Волна превращается в стоячую, электрический ток отсутствует, система находится в диэлектрическом состоянии.

Аллендер, Брэй и Бардин [103] предложили полуфеноменологическое описание флуктуационной фрэлиховской "сверхпроводимости" при $T \gtrsim T_{p0}$. Они показали, что флуктуационное образование бегущих пайерлсовских волн при $T \gtrsim T_{p0}$, может привести к возрастанию проводимости системы, однако не смогли объяснить имеющиеся экспериментальные данные [84, 90] ни в смысле величины проводимости, ни ее температурной зависимости. Попытки последовательного расчета флуктуационного вклада в проводимость при $T \gtrsim T_{p0}$ [117, 119, 120] носят сугубо предварительный характер и не являются убедительными. В работе [121] приводились аргументы в пользу того, что температура перехода, вызывающего повышенную проводимость, соответствующая рассмотрению этого перехода в приближении молекулярного поля, должна составлять сотни градусов Кельвина, что нашло дальнейшее развитие в обсуждавшейся выше работе [113]. При этом была высказана идея, что повышенная проводимость ^{зарядовой} объясняется волной плотности пайерлсовского (или какого-либо другого) типа, образующейся (возможно флуктуационно) при $T \lesssim T_{p0}$, и активационным образом "скользящая" по решетке. В дальнейшем Ли, Райс и Андерсон [122] рассмотрели модель такой

проводимости, основанную на "фрелиховском" механизме. Рассмотрение ведется в пренебрежении флуктуациями, так что при $T < T_{po}$ образуется пайерлсовская волна деформации, которая может распространяться в кристалле, если ее период несоизмерим с периодом исходной решетки. Примеси, соизмеримость с периодом исходной решетки и эффекты трехмерного упорядочения создают препятствия для свободного распространения этой волны /"пиннинг"/. Активационный характер проводимости, упомянутый выше, связан с энергией "пиннинга". Следует отметить, что экспериментальные данные [90] группы Хигера удается разумно описать с помощью эвристической формулы для проводимости, предложенной в работе [121]. В последней работе [123] этой группы утверждается, что имеются прямые экспериментальные свидетельства в пользу картины проводимости, предложенной в [121, 122]. Имеются также предварительные данные, свидетельствующие в пользу такого механизма проводимости в комплексе $K_2Pt(CN)_4 Br_{0.3} \cdot 3H_2O$ [124]. В целом представляется, что интерпретация, данная в работах [121, 122], несмотря на ее более чем предварительный характер, по-видимому, может указывать на возможный механизм аномальной проводимости квазиодномерных систем. В этой связи подчеркнем настоятельную необходимость последовательного рассмотрения роли флуктуаций.

Глава IV

ВЛИЯНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ
НА ПАЙЕРЛСОВСКИЙ ПЕРЕХОД [110]§I. Общие замечания.

Рассмотрим простейший пример пайерлсовского перехода - переход с удвоением периода, т.е. случай наполовину заполненной исходной зоны. При этом термодинамика перехода будет рассматриваться в приближении самосогласованного поля, т.е. в пренебрежении влиянием флуктуаций. Тогда оказывается, что для расчета температуры перехода T_p нужно знать лишь зависимость плотности электронных состояний от деформации решетки $|\Delta|$ и от степени неупорядоченности системы. В самом деле, выражение (3.13) для свободной энергии электронов и решетки, определяющее термодинамику системы, можно переписать в виде:

$$F(|\Delta|, T) = -2T \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \mathcal{N}(|\Delta|, \varepsilon) \ln \left\{ 2ck \frac{\varepsilon}{2T} \right\} + \quad (4.1)$$

$$+ N_0 |\Delta|^2 / \lambda$$

где введена $\mathcal{N}(|\Delta|, \varepsilon)$ - плотность электронных состояний для деформации $|\Delta|$. Ниже температуры пайерлсовского перехода

T_p свободная энергия имеет минимум при $|\Delta| \neq 0$, а T_p определяется как та температура, при которой впервые появляется нетривиальное решение $|\Delta| \neq 0$ уравнения (3.14)

$$\frac{\partial F(|\Delta|, T)}{\partial |\Delta|} \Big|_{|\Delta|=0} = 0 \quad (4.2)$$

Задача, таким образом, сводится к определению плотности электронных состояний $\mathcal{N}(|\Delta|, \varepsilon)$ в неупорядоченной решетке.

Ниже мы будем рассматривать только такие модели неупорядоченности, которые сохраняют симметрию $N(\Delta, \varepsilon)$ относительно $\varepsilon = 0$, т.е. $N(\Delta, \varepsilon) = N(\Delta, -\varepsilon)$. В этом случае химический потенциал электронов $\mu = 0$.

Влияние неупорядоченности на электронные свойства одномерных систем имеет ряд особенностей [34, 35], отличающих их от трехмерных систем. В частности, оказывается, что все электронные состояния одномерной системы локализуются в смысле Андерсона [26], при сколь угодно слабом беспорядке в системе [34, 35, 125, 126]. Конечно, в реальных квазиодномерных системах эти особенности, скорее всего, несколько смазываются, также как соответствующие результаты относительно фазовых переходов в истинно одномерных системах. Тем не менее, злоупотребление приближенными методами при рассмотрении свойств одномерных неупорядоченных систем может привести к недоразумениям. Поэтому воспользуемся моделями неупорядоченности, допускающими точное определение плотности электронных состояний. Таковыми моделями являются модель Ллойда [127] и модель "кусочков" [128]. Таким образом, рассматривая термодинамику перехода в приближении самосогласованного поля, мы точно учитываем влияние неупорядоченности.

§2. Модель Ллойда.

Модель Ллойда представляет собой частный случай модели Андерсона [26], в которой предполагается, что электроны описываются в приближении сильной связи с помощью гамильтониана:

$$H = \sum_j \varepsilon_j a_j^+ a_j + \sum_{ij} J_{ij} a_i^+ a_j \quad (4.3)$$

где узлы i, j, \dots образуют регулярную решетку, параметр перехода электрона с узла на узел J_{ij} (резонансный интеграл) не является случайной величиной и принимается равным константе J , отличной от нуля только для переходов между ближайшими соседями. Однако энергии электрона (уровни) ε_j на различных узлах распределены случайным образом. При этом в модели Ллойда принимается, что распределения ε_j на разных узлах являются независимыми и описываются распределением Лоренца:

$$P(\varepsilon_j) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{\varepsilon_j^2 + \Gamma^2} \quad (4.4)$$

По-видимому, эта модель в качественном отношении адекватна ситуации в платиновых комплексах, где неупорядоченность в расположении ионов галогенов (Br или Cl), а также атомов щелочного металла (K или Rb), приводит к хаотическому потенциалу, действующему на электроны проводимости цепочки.

Ллойд [127] показал, что задача определения одноэлектронной функции Грина в системе с гамильтонианом (4.3), усредненной по ансамблю, определяемому распределениями (4.4), допускает точное решение (даже в трехмерном случае). Зная усредненную функцию Грина, легко найти соответствующую плотность состояний неупорядоченной системы $N(\varepsilon)$ ($\Gamma \neq 0$), которая выражается через плотность состояний $N_0(\varepsilon)$ в идеальной решетке ($\Gamma = 0$) с помощью соотношения [127]:

$$N(\varepsilon) = \frac{\Gamma}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon' \frac{N_0(\varepsilon')}{(\varepsilon - \varepsilon')^2 + \Gamma^2} \quad (4.5)$$

В идеальной решетке с удвоенным периодом спектр электронов

имеет вид (3.11):

$$E_p = \pm \sqrt{|\Delta|^2 + 4J^2 \cos^2 pa} \quad (4.6)$$

где в случае половинного заполнения исходной зоны $\epsilon_F = 2J$. Соответствующая плотность состояний в окрестности уровня Ферми приводилась в (3.12). Плотность состояний, пропорциональная производной dp/dE , обращается в бесконечность на краях подзон ($pa = 0; \pi$). Неупорядоченность размывает эти особенности согласно (4.5).

Отметим, что в модели Ллойда свободная энергия электронов в (4.1) бесконечна из-за медленного убывания лоренцовской функции распределения (4.4) при $\epsilon_j \rightarrow \infty$, однако эта расходимость для нас несущественна, так как соответствующая производная $\frac{\partial F(|\Delta|, T)}{\partial |\Delta|}$ конечна. Расходимость же (4.1) при больших ϵ нефизична и связана со спецификой лоренцовского распределения, она устраняется учетом энергии ионов в том же потенциальном поле ϵ_j .

Учитывая условие $\frac{|\Delta|}{\epsilon_F} \ll 1$ в случае слабой неупорядоченности $\frac{\Gamma}{\epsilon_F} \ll 1$, получаем из (4.1), (4.2), (4.5), (4.6) следующее уравнение для температуры перехода:

$$1 = \lambda \int_0^{\epsilon_F} \frac{d\epsilon}{\sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{\epsilon_F^2}}} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + \Gamma^2} \operatorname{th} \frac{\epsilon}{2T} \quad (4.7)$$

где λ — безразмерная константа электрон-фононного взаимодействия, введенная в (3.13). При $\Gamma \rightarrow 0$ (4.7) естественно переходит в (3.16). Размытие особенности в плотности состояний на краях подзон из-за неупорядоченности приводит к появлению в

(4.7) регулярного при $\varepsilon \rightarrow 0$ множителя $\frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + \Gamma^2}$, который уменьшает температуру перехода

Уравнение (4.7) легко преобразуется к виду:

$$\ln \frac{T_{p0}}{T} = \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma}{2\pi T} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \quad (4.8)$$

где $T_{p0} = \frac{\gamma}{\pi} 4\varepsilon_F e^{-\frac{1}{\lambda}}$ (см. (3.17)) - температура перехода в идеальной решетке, $\psi(x)$ - логарифмическая производная Γ -функции (дигамма функция). Из (4.8) видна полная аналогия между влиянием неупорядоченности решетки на пайерлсовский переход и влиянием магнитных примесей на сверхпроводящий переход [77]. Для случая неупорядоченности, создаваемой обычными примесями в цепочке, эта же аналогия независимо отмечена в работе [129], что подчеркивает сходство пайерлсовской системы с системой типа экситонного изолятора [76, 78].

С увеличением неупорядоченности Γ температура пайерлсовского перехода T_p падает, и неустойчивость исчезает, когда $\Gamma = \Gamma_c = \frac{1}{2} |\Delta_0|$, где $|\Delta_0|$ - пайерлсовская щель в спектре идеальной системы при $T=0$, равная $\frac{\pi}{\gamma} T_{p0}$ (3.19). Физический смысл критического Γ очевиден.

При $T=0$, аналогично переходу от (3.13) к (3.18), мы можем найти параметр $|\Delta|$ в неупорядоченной системе (4.3), (4.4). Зависимость $|\Delta|$ от параметра неупорядоченности определяется при этом уравнением:

$$\ln \frac{|\Delta|}{\Gamma} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dx \frac{\ln \{ 1 + \sqrt{(\frac{|\Delta|}{\Gamma} x)^2 + 1} \}}{1 + x^2} \quad (4.9)$$

В случае малой неупорядоченности ($\Gamma \ll |\Delta_0|$) из (4.8),

(4.9) получаем:

$$T_p \approx T_{p0} \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{4\gamma} \frac{\Gamma}{|\Delta_0|} \right\} \quad (4.10)$$

$$|\Delta| \approx |\Delta_0| \left\{ 1 - \frac{\Gamma}{|\Delta_0|} \ln \frac{2e|\Delta_0|}{\Gamma} \right\} \quad (4.11)$$

Вблизи Γ_c , когда температура T_p мала ($T_p \ll T_{p0}$), получаем:

$$T_p \approx \frac{T_{p0}}{4\gamma} \ln \frac{|\Delta_0|}{2\Gamma} \quad (4.12)$$

$$\frac{|\Delta|}{\Gamma} \ln \frac{2e\Gamma}{|\Delta|} \approx \frac{\pi}{4} \ln \frac{|\Delta_0|}{2\Gamma} \quad (4.13)$$

Из (4.10)-(4.13) видно, что в модели Ллойда отношение $|\Delta|/T_p$ меняется от $\pi/4$ (значение БКШ) до нуля при изменении от нуля до Γ_c .

Отметим, что пайерлсовский переход в неупорядоченной системе, вообще говоря, не приводит к появлению щели в электронном спектре, так как плотность состояний может быть отлична от нуля и в области энергий от $(-|\Delta|)$ до $|\Delta|$, хотя в этой области имеется провал плотности состояний, т.е. псевдощель. Например, в модели Ллойда (4.5) всегда приводит к конечной плотности состояний в центре исходной зоны (на уровне Ферми):

$$\mathcal{N}(|\Delta|, 0) = \frac{2\Gamma}{|\Delta_0|\epsilon_F} < \mathcal{N}_0 = \frac{1}{\epsilon_F} \quad (4.14)$$

При $\Gamma \rightarrow \Gamma_c$ $\mathcal{N}(|\Delta|, 0) \rightarrow \mathcal{N}_0$, т.е. псевдощель закрывается, и система переходит в "металлическое" состояние.

§3. Модель "кусочков".

Модель кусочков, применявшаяся для интерпретации ряда свойств реальных квазиодномерных систем [83, 128], реализуется, если в одномерной цепочке есть дефекты структуры или примесные атомы, через которые электроны проводимости с энергией порядка энергии Ферми вообще не могут пройти. Примером, возможно, могут служить примесные атомы (молекулы) с полностью заполненной оболочкой [128]. Ясно, впрочем, что эта ситуация в реальных системах может реализоваться только с той или иной степенью приближения. В гамильтониане (4.3) такая модель отвечает случаю, когда все $\varepsilon_j = 0$; но резонансный интеграл J_{jj+1} является случайной величиной, принимающей для некоторых соседних атомов $j, j+1$ значение нуль, в то время как для других его значение считается таким же, как в идеальной решетке. Тогда для электронов линейная система атомов разбивается на ряд взаимодействующих "кусочков", и пайерлсовский переход в каждом из таких кусочков происходит независимо *) при температуре T_p , которая зависит от числа атомов в кусочке.

*) При таком рассмотрении отсутствует понятие температуры перехода для системы в целом. Формально можно определить эту температуру, используя в (4.1) плотность состояний, усредненную по ансамблю кусочков. Ясно, что при хаотическом распределении барьеров в цепочках в ансамбле доминируют кусочки с размерами порядка некоторого среднего, что и определит физическую температуру перехода.

В кусочке с N атомами спектр электронов в приближении сильной связи после удвоения периода описывается выражением (4.6), в котором квазиимпульс принимает дискретные значения:

$$pa = \frac{2\pi n}{N}; \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2 \quad (4.15)$$

что приводит к дискретному характеру самого спектра, при конечных N . Это приводит к ослаблению найерлсовской неустойчивости, так что при уменьшении N температура перехода $T_p \rightarrow 0$.

Тогда плотность электронных состояний в кусочке с N атомами равна:

$$N(|\Delta|, \varepsilon) = \sum_{n=-N/2}^{N/2} \delta \left(\varepsilon \pm \sqrt{|\Delta|^2 + 4J^2 \cos^2 \frac{2\pi n}{N}} \right) \quad (4.16)$$

Из (4.1) и условия ее экстремальности, аналогично переходу от (3.13) к (3.15), получаем уравнение, определяющее зависимость параметра $|\Delta|$ от температуры:

$$1 = \lambda \sum_{n=-N/2}^{N/2} tk \frac{1}{2T} \frac{1}{\sqrt{|\Delta|^2 + 4J^2 \cos^2 \frac{2\pi n}{N}}} \frac{1}{\sqrt{|\Delta|^2 + 4J^2 \cos^2 \frac{2\pi n}{N}}} \quad (4.17)$$

Для проведения суммирования воспользуемся известной формулой Пуассона:

$$\begin{aligned} \sum_{n=-N/2}^{N/2} f(n) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-N/2}^{N/2} dx e^{-2\pi i k x} f(x) = \\ &= \int_{-N/2}^{N/2} dx f(x) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \int_{-N/2}^{N/2} dx \cos 2\pi k x f(x) \end{aligned} \quad (4.18)$$

которая получается с использованием известного тождества

$$\delta(x-n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x} \quad . \text{ С использованием этой формулы} \\ (4.17) \text{ удается переписать в виде } (\varepsilon_F = 2J):$$

$$1 = \lambda \int_0^{\varepsilon_F} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{1 - \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon_F^2}}} \frac{th \frac{1}{2T} \sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \left\{ 1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \cos Nk \operatorname{arccos} \frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} \right\} \quad (4.19)$$

Заметим, что рассмотрение (4.16)–(4.19) справедливо, когда

N выбирается равным удвоенному нечетному числу. Тогда химический потенциал $\mu = 0$, что и предполагалось выше. Окончательные результаты от выбора N , по-видимому, не зависят.

Тогда, используя условие $T_{p0} \ll \varepsilon_F$ и выбор N в виде удвоенного нечетного числа, получаем из (4.19) уравнение для температуры перехода:

$$\ln \frac{T_{p0}}{T} = 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2k-1} \frac{1}{e^{(2k-1) \frac{\pi T}{\Delta_N}} + 1} \quad (4.20)$$

где

$$\Delta_N = \frac{\varepsilon_F}{N} \quad (4.21)$$

есть среднее расстояние между уровнями дискретного спектра в недеформированном кусочке.

Для параметра порядка $|\Delta|$ при $T = 0$ из (4.19) имеем:

$$\ln \frac{|\Delta|}{|\Delta_0|} = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k K_0 \left(k \frac{|\Delta|}{|\Delta_N|} \right) \quad (4.22)$$

где $K_0(x)$ – модифицированная функция Бесселя.

Заметим, что (4.22) совпадает с уравнением для темпера-

турной зависимости щели в теории БКШ [21] с учетом замены $T \Rightarrow \Delta_N$. В этом смысле можно сказать, что конечные размеры кусочка подавляют в нем пайерлсовский переход, аналогично температуре в теории сверхпроводимости.

Из (4.20) и (4.22) получаем при больших N , когда $\Delta_N \ll |\Delta_0|$:

$$T_p \approx T_{p0} \left\{ 1 - 4e^{-\gamma \frac{|\Delta_0|}{\Delta_N}} \right\} \quad (4.23)$$

$$|\Delta| \approx |\Delta_0| \left\{ 1 - \sqrt{\pi} \frac{\Delta_N}{|\Delta_0|} e^{-\frac{|\Delta_0|}{\Delta_N}} \right\} \quad (4.24)$$

При малых $T_p \ll T_{p0}$ имеем:

$$T_p \approx \frac{6T_{p0}}{\pi} \ln \frac{T_{p0}}{\Delta_N} \quad (4.25)$$

$$|\Delta| \approx \frac{\pi T_{p0}}{\sqrt{7\zeta(3)}} \sqrt{8 \ln \frac{T_{p0}}{\Delta_N}} \quad (4.26)$$

где $\zeta(x)$ — дзета-функция Римана. Пайерлсовский переход вообще не происходит, если $N < N_c = \frac{\epsilon_F}{T_{p0}}$. Отношение $\frac{|\Delta|}{T_p}$ в модели кусочков меняется от $\frac{\pi}{8}$ (значение БКШ) до ∞ при изменении N от ∞ до N_c .

§4. Обсуждение.

Модели, рассмотренные выше, различны по характеру неупорядоченности. Для того, чтобы сравнить полученные в них результаты, и, в частности, критерии подавления пайерлсовского перехода, введем такую универсальную для одномерных неупорядочен-

ных систем величину, как длина локализации электрона. (Напомним, что в одномерной неупорядоченной системе все электронные состояния локализованы [35, 36, 125, 126]). Эта величина заменяет в одномерном случае понятие длины свободного пробега и, по существу, имеет сходный смысл.

Ясно, что в модели "кусочков" длина локализации, выраженная в межатомных расстояниях, совпадает с N , т.е. с размерами кусочка. В модели Ллойда длина локализации рассчитана Таулесом [130], с помощью установленного им в этой работе общего соотношения между плотностью электронных состояний и длиной локализации, справедливого для одномерных неупорядоченных систем. Из [130] имеем следующее общее выражение для длины локализации l (выраженной в межатомных расстояниях) в модели Ллойда:

$$c\hbar \frac{1}{l} = \frac{1}{4J} \left\{ [(2J+\varepsilon)^2 + \Gamma^2]^{1/2} + [(2J-\varepsilon)^2 + \Gamma^2]^{1/2} \right\} \quad (4.27)$$

В частности, для электронных состояний в центре исходной зоны ($\varepsilon = 0$) с учетом $\frac{\Gamma}{\varepsilon_F} \ll 1$ получаем

$$l \approx \frac{2J}{\Gamma} = \frac{\varepsilon_F}{\Gamma} \quad (4.28)$$

Тогда убеждаемся, что выражение через длину локализации параметры Γ и Δ_N , характеризующие степень неупорядоченности в модели Ллойда и модели "кусочков", совпадают и равны

$$\frac{2J}{l} = \frac{\varepsilon_F}{l} .$$

Для критической длины локализации в этих моделях получаем очень близкие значения $\frac{2J}{\pi} \frac{\varepsilon_F}{T_{po}} \approx 1.13 \frac{\varepsilon_F}{T_{po}}$ и $\frac{\varepsilon_F}{T_{po}}$ соответственно.

Таким образом, критерий возможности пайерлсовского перехода в одномерной неупорядоченной системе выраженный через длину локализации:

$$l > l_c \approx \frac{\varepsilon_F}{T_{p0}} = \frac{2J}{T_{p0}} \quad (4.29)$$

является, по-видимому, универсальным и пригодным для оценок в любой модели неупорядоченности.

Однако конкретное поведение различных величин, описывающих переход, зависит от модели неупорядоченности. Например, отношение $\frac{|\Delta|}{T_p}$ может отличаться от БКШ значения $\frac{\pi}{8}$ в любую сторону, также как само влияние неупорядоченности можно сравнивать либо с влиянием магнитных примесей (модель Ллойда), либо с влиянием температуры (модель "кусочков") на сверхпроводящий переход. В любом случае неупорядоченность подавляет возможность пайерлсовского перехода.

Если имеющиеся данные структурных исследований комплекса $K_2 Pt(CN)_4 Br_{0.3} 3H_2O$ [86-89] интерпретировать таким образом, что наблюдающаяся сверхструктура и смягчение фононной моды являются предвестниками пайерлсовского перехода [83], то переход происходит, по-видимому, при $T_p \approx 10^2$ °К. Тогда полученные выше результаты позволяют предположить, что малость отношения T_p/ε_F в $K_2 Pt(CN)_4 Br_{0.3} 3H_2O$ ($\varepsilon_F \approx 2$ эВ) может быть связана с неупорядоченностью в расположении ионов Br. Считая, что неупорядоченность не меняет отношения $\frac{T_p}{T_{p0}} \approx 0.25$ [113], получим $T_{p0} \approx 400$ °К. Используя $\varepsilon_F \approx 0.3$ эВ, получаем из (4.29) $l_c \approx 15$, что соответст-

вует $\Gamma \approx 0.04 \text{ эв}$ в (4.28). Столь малая величина хаотического потенциала кажется довольно удивительной, так как на расстояниях порядка межатомных внешние электроны Pt вряд ли могут сильно заэкранировать заряд ионов K и Br . Вероятно это свидетельствует о том, что неупорядоченность может существенно уменьшить отношение $\frac{T_p}{T_{p0}}$, по сравнению с "идеальным" значением 0.25.

Отметим, что к подавлению пайерлсовской нестабильности могут приводить также переходы электронов между цепочками, нарушающие условие симметрии электронного спектра исходной зоны:

$$\varepsilon(p) - \mu = -\varepsilon(p+q) + \mu \quad (4.30)$$

(q - волновой вектор пайерлсовской деформации), необходимое для появления неустойчивости решетки в трехмерном кристалле [131, 132]. (В одномерной системе (4.30) выполняется всегда для $q = 2p_F$). Если через W обозначить резонансный интеграл мецепочечных переходов, ведущих к нарушению (4.30), то температура перехода T_p понижается в меру отношения $\frac{W}{T_{p0}}$ [132]. При комнатной температуре анизотропия проводимости в $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}3H_2O$ превышает 10^4 [83], и для этого соединения, по-видимому, $W \ll T_{p0}$.

В [83] делаются попытки объяснить спад проводимости в $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}3H_2O$ с температурой появлением пайерлсовской щели. Как неоднократно отмечалось выше, в неупорядоченной системе щель в спектре заменяется на "псевдощель", так что появление параметра порядка $|\Delta|$ не приводит, вообще говоря, к экспоненциальному спаду проводимости с температурой. Проводимость при низких температурах в этом случае определяется при-

ками электронов по уровням энергии, находящемся внутри псевдощели [60, 61]. Имеющиеся экспериментальные данные соответствуют такой интерпретации [133, 134].

Появление псевдощели должно экспериментально проявляться в падении электронной теплоемкости при низких температурах, пропорциональной плотности состояний на уровне Ферми. Поэтому малая величина электронной теплоемкости в $K_2Pt(CN)_4Cl_{0.3} \cdot 3H_2O$ при низких температурах, измеренная в работе [135], может быть объяснена тем, что в этом кристалле, как и в $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$, происходит пайерлсовский переход.

Полученные выше результаты позволяют также объяснить почему не наблюдается пайерлсовский переход в хорошо проводящих солях $TCNQ$ с асимметричными катионами [82]. Как показано в работе [136] свойства этих соединений могут быть поняты, если предположить, что резонансный интеграл электронных переходов между ближайшими соседями является случайной величиной и может принимать сколь угодно малые значения, что сводит рассмотрение к модели "кусочков". Тогда длина локализации может оказаться достаточно малой, и пайерлсовский переход будет полностью подавлен.

В заключение отметим предварительное сообщение о работе [137], в которой также рассматривается влияние неупорядоченности на пайерлсовский переход, а соответствующие критерии формулируются с помощью представлений и длины локализации.

Г л а в а У

ВЛИЯНИЕ ФЛУКТУАЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ПРИ
ПАЙЕРЛСОВСКОМ ПЕРЕХОДЕ§1. Энергетический спектр [115].

Рассмотрим модель пайерлсовского перехода, предложенную в работе Ли, Райса и Андерсона [113] и основанную на одномерном разложении Гинзбурга-Ландау для свободной энергии, являющимся естественным обобщением рассматривавшегося выше разложения (3.20). Принимается, что в одномерной системе, описываемой гамильтонианом (3.1)-(3.5), можно перейти к рассмотрению фазового перехода на языке флуктуирующего C -числового параметра порядка, вводимого аналогично (3.6):

$$\Delta_q = g(q) \langle b_q + b_{-q}^+ \rangle \quad (5.1)$$

таким образом, что термодинамика перехода будет описываться разложением свободной энергии типа Гинзбурга-Ландау:

$$F(|\Delta_q|, T) - F(0, T) = a(T) |\Delta_q|^2 + b(T) |\Delta_q|^4 + \\ + c(T) (q - 2p_F)^2 |\Delta_q|^2 + \dots \quad (5.2)$$

где коэффициенты разложения определены следующим образом [113, 103]: (ср. (3.21))

$$a(T) = N_0 \frac{T - T_{p0}}{T_{p0}}$$

$$b(T) = \left\{ b_0 + (b_1 - b_0) \frac{T}{T_{p0}} \right\} \frac{N_0}{T_{p0}^2} \quad (5.3)$$

$$c(T) = N_0 \xi_0^2(T)$$

где

$$T_{p0} = \frac{4\gamma}{\pi} \varepsilon_F e^{-\frac{1}{\lambda}} \quad (5.4)$$

- температура перехода в приближение самосогласованного поля (3.17),

$$\xi_0^2(T) = \frac{7Z(13) v_F^2}{16\pi^2 T^2} \quad (5.5)$$

$$b_0 = \frac{1}{2} \frac{\gamma^2}{\pi^2} ; \quad b_1 = \frac{7Z(13)}{16\pi^2} \quad (5.6)$$

В отличие от (3.20), (3.21) здесь принята температурная зависимость коэффициентов, так чтобы можно было экстраполировать расчеты к температурам существенно ниже T_{p0} . Например, коэффициент $b(T)$ представляет собой линейную интерполяцию между его значением при $T \approx T_{p0}$ (3.21) и значением, воспроизводящим результат теории самосогласованного поля для $|\Delta_0|$ при $T = 0$ (ср. (3.19)). Член разложения (5.2), связанный с коэффициентом $c(T)$ представляет собой дополнительную энергию, которую необходимо затратить для того, чтобы флуктуационно открыть щель в спектре при $q \neq 2p_F$ (ср. 103).

Заметим, что разложение (5.2), строго говоря, пригодно только для $2p_F$ несоизмеримого с периодом исходной решетки [113]. Мы не обсуждаем соответствующих тонкостей. Некоторые

оценки приведены в [II3, I22].

Разложение (5.2) полностью определяет термодинамику в рамках принятой модели, в частности, можно рассчитать поведение основных корреляционных функций параметра порядка, описывающих температурное поведение его флуктуаций [II3, II4].

Мы можем теперь перейти к расчету электронных свойств данной модели, т.е. рассмотреть задачу об электроне в поле флуктуаций Δ_q , задаваемых уравнениями (5.2)-(5.6). Гамильтониан взаимодействия электрона с флуктуациями имеет (Ср. (3.5)) вид:

$$H_{int} = \sum_{p,q} \Delta_q a_{p+q}^+ a_p \quad (5.7)$$

что в случае строго одномерной модели (в отсутствие истинного фазового перехода [II4]) приводит к следующему виду простейшей собственно-энергетической части одноэлектронной функции Грина [II3]:

$$\sum (\varepsilon_n p) = \langle \Delta^2 \rangle \int \frac{dq}{2\pi} S(q) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p+q}} \quad (5.8)$$

где $S(q)$ - статический структурный фактор флуктуаций параметра, пропорциональный фурье-образу парной корреляционной функции параметра порядка, $\langle \Delta^2 \rangle$ - средний квадрат флуктуаций Δ_q [II4]. В координатном представлении парная корреляционная функция параметра порядка в рассматриваемой модели равна [II3, II4]:

$$\langle \psi(x) \psi(x') \rangle = 2 \langle \Delta^2 \rangle \exp \left\{ -|x-x'| \zeta^{-1}(\tau) \right\} \times \cos 2p_F(x-x') \quad (5.9)$$

где $\psi(x)$ определено аналогично (3.7), $\xi(T)$ - зависящая от температуры длина корреляции флуктуаций, рассчитанная в [II3, II4]. Фурье-преобразование (5.9) дает:

$$\frac{1}{2} S(q) = \frac{\xi^{-1}(T)}{(q-2p_F)^2 + \xi^{-2}(T)} + \frac{\xi^{-1}(T)}{(q+2p_F)^2 + \xi^{-2}(T)} \quad (5.10)$$

Температурная зависимость $\xi(T)$ согласно расчетам работ [II3, II4] приведена на рис. 2I. Температурная зависимость среднего квадрата флуктуаций, также как и его величина, в области $T < T_{p0}$ мало отличаются от температурной зависимости и величины квадрата параметра порядка в приближении молекулярного поля (т.е. определяемого из (3.15)) [II4]. Отсюда ясно, что при $T < T_{p0}$ в системе возникают флуктуации параметра порядка, радиус корреляций которых резко (экспоненциально) возрастает при $T \approx 0.25 T_{p0}$. Амплитуда их того же порядка величины, что и параметр порядка (щель в спектре) в приближении молекулярного поля. Поэтому рассматриваемая модель пайерлсовского перехода, по сути дела, совпадает с рассматривавшейся в Главе I моделью одномерного "жидкого полупроводника" и может быть рассмотрена использовавшимися там методами.

В самом деле, рассматривая теперь электрон с $p \sim +p_F$ из (5.8) и (5.10) имеем:

$$\begin{aligned} \sum (\epsilon_n p) &= \langle \Delta^2 \rangle \left\{ i\epsilon_n + \xi_p + i v_F \xi^{-1}(T) \right\}^{-1} \approx \\ &\approx |\Delta|^2 \left\{ i\epsilon_n + \xi_p \right\}^{-1}; \quad |\Delta|^2 \equiv \langle \Delta^2 \rangle \end{aligned} \quad (5.11)$$

где мы учли $\xi_{p-2p_F} = -\xi_p$. Приближенное равенство в

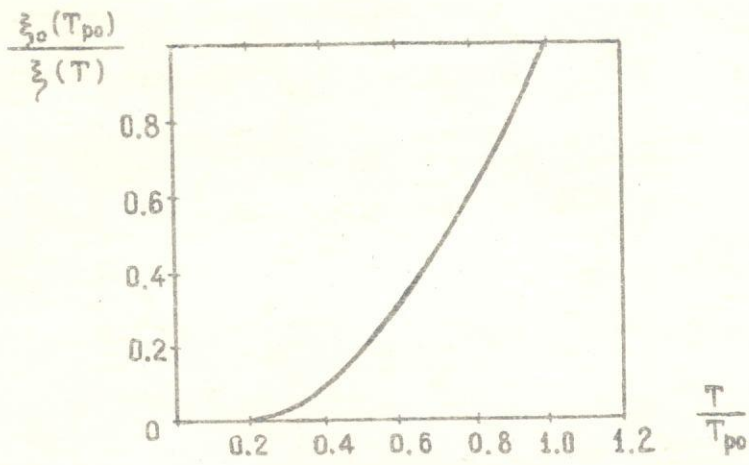


Рис.21. Корреляционная длина $\xi(T)$ как функция температуры.

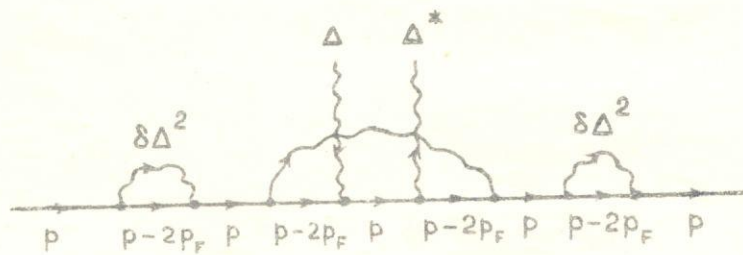


Рис.22. Типичный график теории возмущений в поле /5.16/.

(5.11) имеет место (поправки на конечную ширину пика малы), если выполнены условия:

$$\xi(T) \gg |p - p_F|^{-1}$$

$$v_F \xi^{-1}(T) \ll 2\pi T$$

(5.12)

совпадающие с (2.23) и имеющие тот же физический смысл. При $T \sim 0.25 T_{p0}$, когда корреляционная длина велика (5.12) накладывает несущественные ограничения на наше рассмотрение. При этом $|\Delta|^2$ в (5.11) можно вычислять в приближении самосогласованного поля. Напомним, что по данным [86] $\frac{\xi}{a}(T = 300^\circ\text{K}) > 10^2$, а по данным [89] $\frac{\xi}{a}(T = 300^\circ\text{K}) > 20$, где a — расстояние Pt-Pt в соединении $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3}3H_2O$, так что (5.12) ограничивает наше рассмотрение лишь в очень узкой окрестности уровня Ферми даже при достаточно высоких температурах. Оценки работы [113] для $T \approx 300^\circ\text{K}$ менее благоприятны: $\frac{\xi}{a}(T = 300^\circ\text{K}) \approx 7$, однако из рис. 21 ясно, что всегда существует область температур $T \gtrsim 0.25 T_{p0}$, где (5.12) несущественно.

Используя приближение (5.11) в диаграммах высших порядков, можно провести суммирование ряда теории возмущений также, как это было сделано в §2 Главы II. Это позволяет существенно обобщить рассмотрение работы [113], в которой учитывалась только простейшая диаграмма, соответствующая (5.11). Подчеркнем, что все высшие корреляторы параметра порядка считаются факторизующимися через парные, что соответствует учету только гауссовых флуктуаций. При этом скорее всего недооценивается

роль флуктуаций в области $T \ll 0.25 T_{pc}$.

Выполняя суммирование, получаем одноэлектронную функцию Грина в виде (2.28):

$$G(\varepsilon_n p) = \int_0^{\infty} dz e^{-z} \frac{i\varepsilon_n + zp}{(i\varepsilon_n)^2 - z^2 - z|\Delta|^2} \equiv \quad (5.13)$$

$$\equiv \langle G_{z\Delta^2}(\varepsilon_n p) \rangle_z$$

где

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon_n p) = \frac{i\varepsilon_n + zp}{(i\varepsilon_n)^2 - z^2 - |\Delta|^2} \quad (5.14)$$

есть нормальная функция Грина идеального пайерлсовского диэлектрика (3.10) с энергетической щелью $2|\Delta|$. Физический смысл (5.13) подробно обсуждался в Главе II. Как уже было показано, одноэлектронная функция Грина (5.13) приводит к плотности состояний (2.39)

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \frac{|\varepsilon|}{|\Delta|} \int_0^{\varepsilon^2/|\Delta|^2} dz \frac{e^{-z}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{|\Delta|^2} - z}} = \quad (5.15)$$

$$= 2 \frac{|\varepsilon|}{|\Delta|} e^{-\frac{\varepsilon^2}{|\Delta|^2}} \text{Erfi} \left(\frac{\varepsilon}{|\Delta|} \right)$$

с типичной псевдощелью, графически представленной на Рис.8. Ширина псевдощели порядка $2|\Delta|$. Обращение плотности состояний в нуль на уровне Ферми (в центре псевдощели), как уже указывалось в Главе II, нефизично и есть следствие принятого приближения (5.12). Таким образом суммирование широкого класса

диаграмм подтверждает основной результат Ли, Райса и Андерсона [113] о существовании псевдощели в плотности электронных состояний при $T \gtrsim 0,25 T_{p0}$.

Если экстраполировать наше рассмотрение в область $T < 0,25 T_{p0}$, то видно, что полученные формулы дают точное описание плотности состояний (условия (4.12) несущественны при $T < 0,25 T_{p0}$) в рамках принятого приближения гауссовых флуктуаций. В отличие от работы [113] результат (5.15) не переходит при $T \rightarrow 0$ в выражение для идеального пайерлсовского диэлектрика (3.12), что соответствует отсутствию истинного фазового перехода в строго одномерной системе. Учет дополнительных негауссовых флуктуаций вряд ли может изменить этот результат. Вместе с тем, в соответствии с идеологией работы [113] следует отметить, что при $T \lesssim 0,25 T_{p0}$ в системе, вероятно, произойдет трехмерное упорядочение и установится сильная корреляция параллельных цепочек [87, 89]. Из-за такой корреляции может стабилизироваться истинный фазовый переход. В настоящее время трудно написать какие-либо строгие формулы, описывающие флуктуации в такой ситуации. Однако качественно можно представлять себе следующее. При $T < T_p$ (возможно, что $T_p \approx 0,25 T_{p0}$) в системе возникает истинный дальний порядок (по крайней мере вдоль отдельной цепочки атомов), так что параметр порядка (5.1) будет иметь вид:

$$\Delta_q = \Delta + \delta \Delta_q \quad (5.16)$$

где Δ - когерентное поле, описывающее равновесную периодическую деформацию цепочки с $q = 2p_F$ (Ср. (3.6)-(3.7)). (Рас-

считываем только случай; когда вектор q направлен вдоль цепочки). $\delta\Delta_q$ - флуктуация параметра порядка. При этом из общих соображений можно только утверждать, что:

$$|\Delta| = \begin{cases} 0 & \text{при } T > T_p \\ \frac{\pi}{\gamma} T_{p0} & \text{при } T = 0 \end{cases} \quad (5.17)$$

тогда как средний квадрат флуктуаций:

$$\langle \delta\Delta^2 \rangle = \begin{cases} \langle \Delta^2 \rangle & \text{при } T > T_p \\ \delta\Delta^2 \rightarrow 0 & T \rightarrow 0 \end{cases} \quad (5.18) \text{ *)}$$

где $\langle \Delta^2 \rangle$ при $T > T_p$ определяется формулами работы [II4]. Корреляционная функция флуктуации вдоль цепочки имеет вид (5.9), (5.10), но в качестве амплитуды перед косинусом в (5.9) стоит (5.18). Корреляционная длина вдоль цепочки ведет себя обычным для теории фазовых переходов образом:

$$\frac{\xi(T)}{\xi_0(T_{p0})} = \begin{cases} \left| \frac{T - T_p}{T_p} \right|^{-\nu} & \text{при } T \gtrsim T_p \\ \left| \frac{T - T_p}{T_p} \right|^{-\nu'} & \text{при } T \lesssim T_p \end{cases} \quad (5.19)$$

*) Величина флуктуаций в области $T \lesssim T_p$ определяется трехмерными эффектами. Если обобщить рассмотрение, основанное на функционале Гинзбурга-Ландау (5.2), включив взаимодействие соседних цепочек, равное W на атом, то, как указал автору Л.Н.Булаевский, флуктуации малы ($|\delta\Delta| \ll |\Delta|$) при $W \frac{\xi_0(T_{p0})}{a} \gg T_{p0}$ (сильные эффекты трехмерности) и велики ($|\delta\Delta| \gg |\Delta|$) при $W \frac{\xi_0(T_{p0})}{a} \ll T_{p0}$, т.е. при $W \ll T_{p0}^2 / \epsilon_F$ (слабое влияние трехмерности). Последнее соотношение, по-видимому, реализуется в платиновых комплексах, что может объяснить результаты нейтронного эксперимента [89].

где ν, ν' - вообще говоря, неизвестные критические индексы. Нам представляется, что такого рода соотношения должны правильно описывать картину пайерлсовского перехода в реальной квазиодномерной системе, где существенно взаимодействие соседних нитей.

Использование (5.16) в гамильтониане (5.7) приводит при $T < T_p$ к задаче об электроне, распространяющемся в суперпозиции когерентного и случайного полей. В диаграммной технике возникает два типа линий взаимодействия: линии когерентного поля Δ , передающие импульс $\pm 2p_F$ и линии случайного поля, которым сопоставляется парный коррелятор $\delta\Delta^2 S(q)$. В окрестности T_p , когда корреляционная длина флуктуаций велика, можно считать (в смысле условий (5.12)), что линии случайного поля также передают импульс $\pm 2p_F$. Типичный график разложения нормальной одноэлектронной функции Грина представлен на Рис.22.

В разложении доминирует последовательность чередующихся гриновских функций $\{i\varepsilon_l - \xi_p\}^{-1}$ и $\{i\varepsilon_l + \xi_p\}^{-1}$. При этом в n -м порядке теории возмущений имеется $2n$ вершин, из которых $2k$ вершин соединено линиями случайного поля флуктуаций, которым сопоставляются множители $|\delta\Delta|^2$, тогда как в $2(n-k)$ вершин вставлены одиночные линии когерентного рассеяния, каждой из которых сопоставляется множитель $\Delta(\Delta^*)$. Тогда разложение функции Грина имеет вид:

$$G(\varepsilon_l \xi_p) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n B_n^k(\varepsilon_l \xi_p) \quad (5.20)$$

где

$$B_n^k(\varepsilon_\ell, \xi_p) = |\Delta|^{2(n-k)} \left[\frac{n!}{k!(n-k)!} \right]^2 |\delta\Delta|^{2k} k! \times \quad (5.21)$$

$$\times \{i\varepsilon_\ell - \xi_p\}^{-n} \{i\varepsilon_\ell + \xi_p\}^{-n} \{i\varepsilon_\ell - \xi_p\}^{-1}$$

В самом деле, на электронной линии имеется $2k$ вершин, к которым прикреплены линии случайного поля. Из них k вершин имеют выходящую линию, которая любым из $k!$ способов входит в оставшиеся k вершин. Множитель $\left[\frac{n!}{k!(n-k)!} \right]^2$ есть число размещений одиночных линий когерентного поля в любых $2(n-k)$ вершинах, выбираемых из общего числа $2n$ вершин с учетом того, что в половине из этих вершин импульс $2p_F$ "входит", тогда как в другой половине "выходит". Используем теперь тождество:

$$(1+x)^n (1+y)^n = \sum_{k_1 k_2=0}^n x^{k_1} y^{k_2} C_n^{k_1} C_n^{k_2} \quad (5.22)$$

и положим в нем $x = \zeta \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|} = |\zeta| e^{i\varphi} \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}$; $y = x^*$. Тогда имеем:

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \left(1 + \zeta \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}\right)^n \left(1 + \zeta^* \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}\right)^n =$$

$$= \sum_{k=0}^n [C_n^k]^2 |\zeta|^{2k} \left(\frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}\right)^{2k} \quad (5.23)$$

Учитывая $\int_0^\infty d|\zeta|^2 |\zeta|^{2k} e^{-|\zeta|^2} = k!$, получаем:

$$G(\epsilon, \rho) = \int_0^{\infty} d|z|^2 e^{-|z|^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{i\epsilon + \bar{z}_p}{(i\epsilon)^2 - \bar{z}_p^2 - |\Delta|^2 \left\{ 1 + |z|^2 \left(\frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|} \right)^2 + 2|z| \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|} \cos\varphi \right\}} \quad (5.24)$$

$$= \frac{1}{\pi} \int d^2 z e^{-|z|^2} \frac{i\epsilon + \bar{z}_p}{(i\epsilon)^2 - \bar{z}_p^2 - |\Delta|^2 \left| 1 + z \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|} \right|^2}$$

где $\int d^2 z \dots \equiv \int d\text{Re}z d\text{Im}z \dots = \int_0^{\infty} d|z| |z| \int_0^{2\pi} d\varphi \dots$

- интегрирование в плоскости z .

Мы получаем нормальную функцию Грина со щелью в спектре, флуктуирующей вблизи равновесного значения.

Выражение для аномальной функции Грина получается совершенно аналогично:

$$F(\epsilon, \rho) = \frac{1}{\pi} \int d^2 z e^{-|z|^2} \frac{\Delta^*}{(i\epsilon)^2 - \bar{z}_p^2 - |\Delta|^2 \left| 1 + z \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|} \right|^2} \quad (5.25)$$

При $|\Delta| \rightarrow 0$ (5.25) стремится к нулю, а (5.24) переходит в (5.13). При $|\delta\Delta| \rightarrow 0$ ($T \rightarrow 0$) (5.24), (5.25) сводятся к (3.10), т.е. получаем идеальный пайерлсовский диэлектрик. При $T > T_p$ $|\Delta| = 0$ сохраняется прежнее рассмотрение. При $T \leq T_p$ $|\Delta| \neq 0$; $|\delta\Delta| \neq 0$. Для плотности состояний из (5.24) получаем:

$$\frac{N(\epsilon)}{N_0} = \frac{|\epsilon|}{\pi} \int d^2 z e^{-|z|^2} \frac{\theta[\epsilon^2 - |\Delta|^2 |1 + z \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}|^2]}{\sqrt{\epsilon^2 - |\Delta|^2 |1 + z \frac{|\delta\Delta|}{|\Delta|}|^2}} \quad (5.26)$$

При $|\delta\Delta| \rightarrow 0$, (т.е. $T \rightarrow 0$) отсюда следует (3.12):

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \begin{cases} \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - |\Delta|^2}} & \text{при } |\varepsilon| > |\Delta| \\ 0 & \text{при } |\varepsilon| < |\Delta| \end{cases} \quad (5.27)$$

что соответствует пайерлсовскому диэлектрику с запрещенной зоной шириной $2|\Delta|$. При конечном $|\Delta| \neq 0$ из (5.26) всегда следует $\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \neq 0$ при $|\varepsilon| < |\Delta|$. Опуская громоздкие выкладки, укажем только, что при $|\varepsilon| \rightarrow 0$:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{|\varepsilon|}{|\Delta|} 1.68 \left\{ 1 - \operatorname{Erfc} \left(\frac{1}{2} \left| \frac{\Delta}{|\Delta|} \right| \right) \right\} \quad (5.28)$$

где $\operatorname{Erfc} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dx e^{-x^2} \approx 1 - \frac{e^{-x^2}}{\sqrt{\pi} x}$ при $|x| \gg 1$,

так что

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \approx \frac{4}{\pi} 1.68 \frac{|\varepsilon|}{|\Delta|} e^{-\frac{1}{4} \left| \frac{\Delta}{|\Delta|} \right|^2} \quad (5.29)$$

при $|\varepsilon| \rightarrow 0$; $|\Delta| \ll |\Delta|$ ($T \rightarrow 0$).

При $|\varepsilon| = |\Delta|$ из (5.26) получаем:

$$\frac{N(|\varepsilon| = |\Delta|)}{N_0} \approx 0.6 \sqrt{\frac{|\Delta|}{|\Delta|}} \quad (5.30)$$

Таким образом, несмотря на наличие когерентного поля, мы получили плотность состояний с псевдощелью. Естественно, что при $|\Delta| < |\Delta|$ плотность состояний в запрещенной зоне экспоненциально мала (Ср. (5.29)). Однако при $T \lesssim T_p$, как отмечалось выше, возможна ситуация, когда $|\Delta| \gtrsim |\Delta|$, так что роль флуктуаций будет весьма существенна и в случае истин-

ного фазового перехода. В окрестности перехода плотность состояний имеет псевдощель как при $T \gtrsim T_p$, так и при $T \lesssim T_p$. В этом смысле точка истинного перехода вообще не выделена. Флуктуации оказываются по своему влиянию аналогичными внутренней неупорядоченности системы, рассматривавшейся в Главе IV: они подавляют истинный переход и "размывают" его влияние на электронные свойства.

§2. Диэлектрические и высокочастотные свойства [II5].

Перейдем к рассмотрению реакции системы на продольное электрическое поле, направленное вдоль "металлических" цепочек. Вариация скалярного потенциала $\delta\varphi_{q\omega}$ (q - волновой вектор, направленный вдоль цепочки, ω - частота внешнего поля) вызывает вариацию одноэлектронной функции Грина:

$$\frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta\varphi_{q\omega}} = G(\epsilon p) J(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) G(\epsilon + \omega p + q) \quad (5.31)$$

где $J(\epsilon p \epsilon + \omega p + q)$ - соответствующая вершинная часть (ср. (2.47)). Если принять строго одномерный вариант модели пайерсовского перехода, рассматривавшейся в предыдущем параграфе, то вариационная производная (5.31) вычисляется непосредственно, так же, как это было сделано при рассмотрении модели "жидких полупроводников" в §4 Главы II. При этом получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta\varphi_{q\omega}} = & -e \langle G_{3\Delta^2}(\epsilon p) G_{3\Delta^2}(\epsilon + \omega p + q) \rangle_3 - \\ & - e \langle F_{3\Delta^2}(\epsilon p) F_{3\Delta^2}^*(\epsilon + \omega p + q) \rangle_3 \end{aligned} \quad (5.32)$$

где e - заряд электрона, $G_{\Delta^2}(\varepsilon\rho)$ и $F_{\Delta^2}(\varepsilon\rho)$ - нормальная и аномальная функция Грина пайерлсовского диэлектрика, определенные в (3.10). Таким образом в теории опять возникает средние от парных произведений аномальных функций Грина, тогда как сами аномальные функции равны нулю в соответствии с отсутствием дальнего порядка в системе.

Поляризационный оператор имеет вид ($\omega_m = 2\pi mT$):

$$\begin{aligned} \Pi(q\omega_m) = & - \int_0^\infty dz e^{-z} 2\pi \sum_n N_0 \rho \int_{-\infty}^\infty dz_p \times \\ & \times \left\{ G_{3\Delta^2}(\varepsilon_n \rho) G_{3\Delta^2}(\varepsilon_n + \omega_m \rho + q) + \right. \\ & \left. + F_{3\Delta^2}(\varepsilon_n \rho) F_{3\Delta^2}(\varepsilon_n + \omega_m \rho + q) \right\} \equiv \langle \Pi_{3\Delta^2}(q\omega_m) \rangle_3 \end{aligned} \quad (5.33)$$

где $\Pi_{\Delta^2}(q\omega_m)$ - поляризационный оператор идеального пайерлсовского диэлектрика, ρ - плотность "металлических" нитей в сечении образца (мы интересуемся откликом единицы объема реальной трехмерной системы). Диэлектрическая проницаемость вдоль "металлических" цепочек определяется как

$$\varepsilon(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi(q\omega) = \langle \varepsilon_{3\Delta^2}(q\omega) \rangle_3 \quad (5.34)$$

где

$$\varepsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi_{\Delta^2}(q\omega) \quad (5.35)$$

Все дальнейшее рассмотрение совпадает с проведенным в §4 Главы II. Расчеты ведутся в тех же приближениях, отличие в числен-

ных множителях связано с одномерностью интегрирования в (5.33).

Всюду полагаем $T=0$.

Сначала рассматриваем случай $\omega=0$. Тогда:

$$\varepsilon_{\Delta^2}(q_0) = 1 + \frac{\chi_D^2}{q^2} \quad (5.36)$$

для $v_F q \gg |\Delta|$

$$\varepsilon_{\Delta^2}(q_0) = 1 + \frac{v_F^2 \chi_D^2}{6|\Delta|^2} = 1 + \frac{\omega_p^2}{6|\Delta|^2} \quad (5.37)$$

для $v_F q \ll |\Delta|$. Здесь введены $\chi_D^2 = 8\pi e^2 N_0 \rho$ - квадрат обратного радиуса дебаевской экранировки, $\omega_p^2 = v_F^2 \chi_D^2$ - квадрат плазменной частоты.

Интерполируя между (5.36) и (5.37) аналогично (2.64) и усредняя по флуктуациям щели, получаем:

$$\varepsilon(q_0) = 1 - \frac{v_F^2 \chi_D^2}{6|\Delta|^2} \exp \frac{v_F^2 q^2}{6|\Delta|^2} Ei \left(-\frac{v_F^2 q^2}{6|\Delta|^2} \right) \quad (5.38)$$

где $Ei(-x)$ - интегральная показательная функция. При $v_F q \gg |\Delta|$ отсюда следует (5.36), а при $v_F q \ll |\Delta|$:

$$\varepsilon(q_0) \cong 1 - \frac{v_F^2 \chi_D^2}{6|\Delta|^2} \ln \gamma \frac{v_F^2 q^2}{6|\Delta|^2} \quad (5.39)$$

- поведение промежуточное между типично металлическим и диэлектрическим.

Перейдем к рассмотрению случая $\omega \neq 0$; $v_F q \ll |\Delta|$.

При $\omega \gg 2|\Delta|$ получаем

$$\text{Re} \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (5.40)$$

При $\omega \ll 2/\Delta l$ получаем (5.37). Аппроксимируя $\text{Re} \varepsilon(\omega)$ во всем интервале частот подобно (2.73) и усредняя по флуктуациям щели имеем:

$$\text{Re} \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6|\Delta l|^2} \text{Ei}\left(-\frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2}\right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \{1 - e^{-\frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2}}\} \quad (5.41)$$

При $\omega \gg 2/\Delta l$ отсюда следует (5.40), а при $\omega \ll 2/\Delta l$:

$$\text{Re} \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6|\Delta l|^2} \ln \gamma \frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2} \quad (5.42)$$

так, что при малых $\omega \ll 2/\Delta l$; $v_F q \ll |\Delta l|$:

$$\text{Re} \varepsilon(q\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6|\Delta l|^2} \ln \gamma \frac{\text{Max}\{\omega^2; v_F^2 q^2\}}{4|\Delta l|^2} \quad (5.43)$$

что справедливо с логарифмической точностью.

Поведение мнимой части диэлектрической проницаемости представляет особый интерес, т.к. она определяет поглощение электромагнитной энергии в системе. Действительная часть проводимости есть:

$$\text{Re} \sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \text{Im} \varepsilon(\omega) \quad (5.44)$$

Аналогично (2.78) находим:

$$\begin{aligned} \text{Im} \varepsilon(\omega) &= \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \frac{|\Delta l|}{\omega^3} \int_0^{\frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2}} dz e^{-z} \frac{z}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2} - z}} = \\ &= \pi \omega_p^2 \frac{|\Delta l|}{\omega^3} e^{-\frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2}} \left\{ \frac{\omega^2}{4|\Delta l|^2} - \frac{d}{d\alpha} \right\} \text{Erfi} \alpha^{1/2} \frac{\omega}{2|\Delta l|} \Big|_{\alpha=1} \end{aligned} \quad (5.45)$$

Асимптотически имеем:

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) \approx \pi \left(\frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \left(\frac{|\Delta|}{\omega} \right)^2 \quad (5.46)$$

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \approx \frac{1}{4} \left(\frac{|\Delta|}{\omega} \right)^2 \frac{\omega_p^2}{\omega}$$

при $\omega \gg 2|\Delta|$. Для $\omega \ll 2|\Delta|$:

$$\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) \approx \frac{\pi}{12} \frac{\omega_p^2}{|\Delta|^2} \quad (5.47)$$

$$\operatorname{Re} \sigma(\omega) \approx \frac{1}{48} \left(\frac{\omega_p}{|\Delta|} \right)^2 \omega \rightarrow 0 \text{ при } \omega \rightarrow 0$$

Таким образом статическая проводимость в нашем приближении обращается в нуль, аналогично статической проводимости найерл-совского диэлектрика при температуре равной нулю. Формулы (5.45)-(5.47) описывают своего рода межзонное поглощение. Максимум поглощения имеет место при $\omega \sim 2|\Delta|$. Качественное поведение $\operatorname{Re} \sigma(\omega)$ и $\operatorname{Im} \varepsilon(\omega)$ такое же, как на Рис.12.

Рассматриваемая модель описывает вещество промежуточно между металлом и диэлектриком: $\operatorname{Im} \varepsilon(\omega)$ при $\omega = 0$ имеет конечный разрыв ($\operatorname{Im} \varepsilon(\omega) = -\operatorname{Im} \varepsilon(-\omega)$). На рис.23 приведены результаты группы Хигера [123] по оптическому поглощению в TTF-TCNQ. Качественное соответствие с полученными результатами очевидно. Кривые Рис.23 соответствуют $2|\Delta| \approx 0,14 \text{ eV}$. Оценим $\operatorname{Re} \sigma(\omega \approx 2|\Delta|)$ экстраполяцией (5.47).

Тогда

$$\operatorname{Re} \sigma_{\max} \approx \frac{1}{24} \left(\frac{\omega_p}{|\Delta|} \right)^2 |\Delta| \quad (5.48)$$

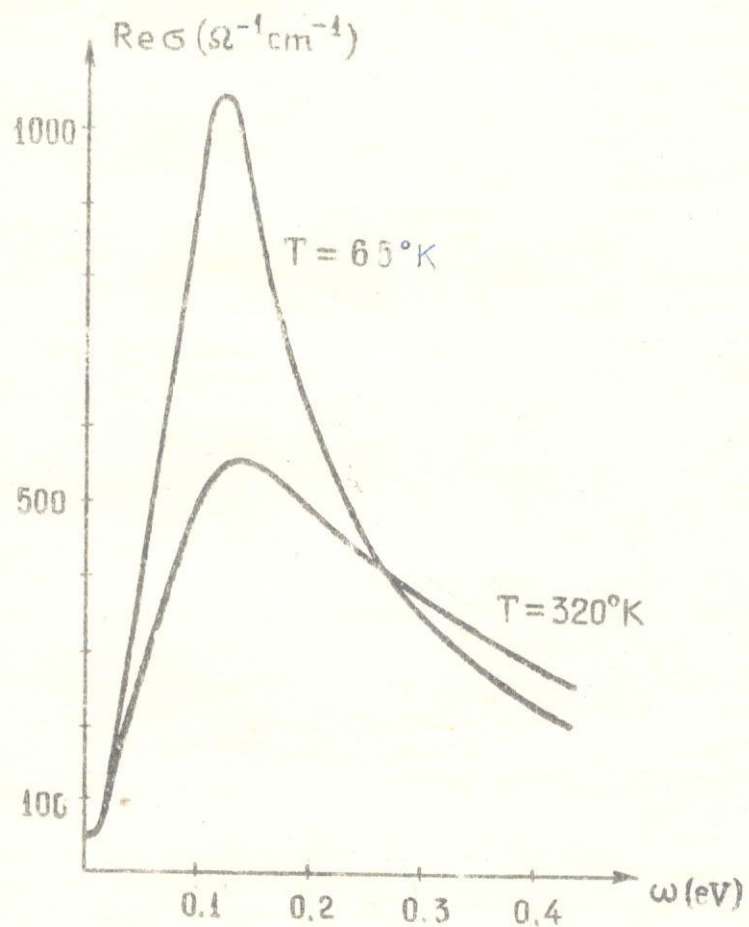


Рис.23. Инфракрасное поглощение в ТТФ-ТСНҚ. [123].
 Дан качественный вид кривых/опущена мел-
 кая структура, соответствующая возбуждению
 молекулярных колебаний/.

Согласно [95] в $TTF-TCNQ$ $\omega_p \approx 1.2 eV$ Тогда (5.48) дает:

$$Re \sigma_{max} \approx 8 \cdot 10^{14} \text{сек}^{-1} = 8 \cdot 10^2 \text{ом}^{-1} \text{см}^{-1}$$

Соответствие с экспериментом следует считать вполне удовлетворительным.

Следует заметить, что формулы, аналогичные (5.44)-(5.47) не усредненные по флуктуациям щели, дают не пик поглощения при $\omega \approx 2/\Delta$, а корневую расходимость $Re \sigma(\omega)$ при $\omega = 2/\Delta$ [122] (ср. (5.45) без интегрирования по ξ). Пайерлсовская щель $2/\Delta = 0.14 eV$ соответствует $T_{po} = 430^\circ K$ [123], что свидетельствует в пользу картины перехода по Ли, Райсу и Андерсону [113].

Использовавшиеся выше приближения, по-видимому, неплохо работают начиная с довольно высоких температур и дают правильное описание высокочастотных свойств системы.

Полученные выше формулы, строго говоря, неприменимы в области малых частот ввиду того, что все рассмотрение несправедливо вблизи уровня Ферми, в смысле первого из условий (5.12). Проведенное вычисление поляризационного спектра справедливо лишь для

$$\omega \geq v_F \xi^{-1} (T) \quad (5.49)$$

Согласно данным Рис. 23 [123] применимость формулы (5.47) ($Re \sigma(\omega) \sim \omega$) нарушается при $\omega \sim 10^{-2} eV$, что возможно свидетельствует, что в рассматриваемой системе $\xi \sim 10^{-6}$ см, что является вполне разумной оценкой.

Большой экспериментальный интерес представляет изучение

$Re \varepsilon(\omega)$ с целью выявления тенденции к аномальному поведению типа (5.42). В [94] наблюдалось возрастание $Re \varepsilon(\omega)$ в области малых частот.

Таким образом, пайерлсовская система, в которой не произошел истинный переход, представляет собой, по-видимому, вещество промежуточное по свойствам между типичными металлами и диэлектриками.

Если при $T_p \approx 0.25 T_{p0}$ в системе происходит упорядочение, то при $T \rightarrow 0$ мы будем иметь диэлектрик пайерлсовского типа. Для него $\varepsilon(\omega q)$ описывается формулами (5.36), (5.37), (5.40) [102, 122]. Однако, как отмечалось выше, при $T \lesssim T_p$ флуктуации могут оказаться весьма существенными, приближая систему к модели, рассматривавшейся в этом параграфе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В заключение настоящей диссертации кратко сформулируем основные полученные в ней результаты. В диссертации с единой точки зрения рассмотрены электронные свойства двух больших классов неупорядоченных систем: расплавов полупроводников ("жидких полупроводников") и квазиодномерных систем, испытывающих пайерлсовский переход. Основные результаты могут быть сформулированы следующим образом.

1. Предложена модель электронного спектра для неупорядоченной системы типа жидкого полупроводника. Получена плотность состояний с ярко выраженной псевдощелью в области энергий, соответствующей запрещенной зоне кристалла. В одномерном варианте модель основывается на дальних корреляциях ближнего порядка, в трехмерном - на специфической модели ионного псевдопотенциала.

2. Рассмотрены диэлектрические и высокочастотные свойства модели жидкого полупроводника. Показано, что она описывает систему, промежуточную по своим свойствам между типичными металлами и полупроводниками. Предсказан аналог межзонного оптического поглощения для жидких полупроводников.

3. Предложена качественная модель перехода системы типа жидкого полупроводника в металлическое состояние с ростом температуры. Эта модель может служить микроскопической основой описания кинетических явлений в жидких полупроводниках на основе теории "протекания" (percolation).

4. Рассмотрено влияние неупорядоченности кристаллической решетки на пайерлсовский структурный переход в квазиодномерных системах. На двух точно решаемых моделях неупорядоченности показано, что неупорядоченность снижает температуру перехода, что в известном смысле аналогично влиянию магнитных примесей на сверхпроводимость.

5. Рассмотрено влияние флуктуаций параметра порядка на электронные свойства при пайерлсовском переходе. В модели перехода типа модели Гинзбурга-Ландау показано, что в отсутствие истинного перехода (в строго одномерной системе) дальнедействующие флуктуации пайерлсовского ближнего порядка делают систему чрезвычайно похожей на одномерный "жидкий полупроводник", что позволяет применить предложенную модель энергетического спектра таких систем. Рассмотрено влияние флуктуаций и в случае истинного фазового перехода.

6. Рассмотрены диэлектрические и высокочастотные свойства системы с пайерлсовскими флуктуациями и показано, что они оказываются промежуточными между типично металлическими и полупроводниковыми. Сравнение с имеющимся экспериментом свидетельствует о качественном соответствии с полученными теоретическими результатами.

В заключение автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю - Леониду Вениаминовичу Келдышу за постоянное внимание и большую помощь в работе.

Он также благодарен Л.Н.Булаевскому, Б.А.Волкову, Д.В.Копяеву Ю.А.Кухаренко, Е.Г.Максимову и Д.И.Хомскому за многочисленные обсуждения и критику, способствовавшие прояснению целого ряда вопросов, затронутых в диссертации.

Л и т е р а т у р а

1. Н. Мотт. Э. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах. "Мир" 1974.
2. Н. Марч. Жидкие металлы. "Металлургия" 1972.
3. T. Faber. Introduction to the Theory of Liquid Metals. Cambridge 1972.
4. В. А. Алексеев. А. А. Андреев. В. Я. Прохоренко. УФН 106, 393/1972/
5. D. Adler. CRC Critical Reviews in Solid State Sciences 2, No. 4 (1971)
6. Н. Мотт. Электронны в неупорядоченных структурах. "Мир" 1969.
7. В. Л. Бонч-Бруевич. А. Г. Миронов. И. П. Звягин. Rivista del Nuovo Cimento 3, 321 (1973)
8. S. R. Ovshinsky. H. Fritzsche. Metallurgical Trans. 2, 641 (1971)
9. Н. К. Henish. Scientific American 221, No. 5, 30 (1969)
10. G. Busch. H. Guntherodt. H. Schätger. Phys. Lett. 33, 64 (1970)
11. А. А. Андреев. В. А. Алексеев. Э. А. Лебедев. М. Мамадалиев. Б. Т. Мелех. А. Р. Регель. Ю. Ф. Рыжков. ФТП 8, 661/1972/
12. R. S. Allgaier. Phys. Rev. 185, 227 (1968); Phys. Rev. B2, 2257 (1970)
13. А. А. Андреев. Докторская диссертация. ЛГУ 1973.
14. N. F. Mott. Phil. Mag. 26, 1249 (1972)
15. G. Busch. H. J. Guntherodt. Proc. Int. Conf. on Magnetism, Moscow (1973)
16. А. Ф. Иоффе. А. Р. Регель. Progr. Semiconductors 4, 237 (1960)
17. А. А. Андреев. В. А. Алексеев. Л. Манукян. Л. Н. Шумилова. ФТП 15, 382/1973/
18. W. Warren. Phys. Rev. B3, 3708 (1971); Phys. Rev. B6, 2522 (1972)
19. Д. Займан. Принципы теории твердого тела. "Мир" 1966.
20. Д. Пайнс. Элементарные возбуждения в твердых телах. М. 1965.

21. А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М. 1962.
22. И. М. Лифшиц. УФН 83, 617/1964/
23. В. Л. Бонч-Бруевич. В сб. Итоги Науки. Физика твердого тела. ВИНТИ 1965.
24. А. И. Губанов. Квантово-электронная теория аморфных проводников. Изд. АН СССР 1963.
25. М. Н. Cohen. J. Non-Crystalline Solids 4, 391 (1971)
26. P. W. Anderson. Phys. Rev. 109, 1492 (1958); Comments on Solid State Physics 2, 193 (1970)
27. J. Ziman. J. Phys. C2, 1230 (1969)
28. E. N. Economou, M. N. Cohen. Phys. Rev. B5, 2931 (1972)
29. P. W. Anderson. Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 69, 1097 (1972)
30. P. W. Anderson, R. Abou-Chakra, D. J. Thouless. J. Phys. C6, 1734 (1973)
31. S. F. Edwards, R. Abram. J. Phys. C5, 1183, 1196 (1972)
32. K. F. Freed. Phys. Rev. B5, 4802 (1972)
33. N. F. Mott. Phil. Mag. 26, 1015 (1972)
34. B. I. Halperin. Adv. Chem. Phys. 13, 123 (1967)
35. Р. Борланд. В сб. Физика простых жидкостей. т. I. "Мир" 1971.
36. D. Weaire, M. Thorpe. Phys. Rev. B4, 2508 (1971)
37. M. Thorpe, D. Weaire. Phys. Rev. B4, 3518 (1971)
38. J. Klima, T. McGill, J. Ziman. Discuss. Faraday Soc. No. 50 (1971)
39. T. McGill, J. Klima. Phys. Rev. B5, 1517 (1972)
40. J. Ziman. J. Phys. C4, 3129 (1971)
41. E. Keller. J. Phys. C4, 3143 (1971)
42. В. Хейне, М. Коэн, Д. Уэйр. Теория псевдопотенциала. "Мир" 1973.
43. S. F. Edwards. Phil. Mag. 6, 617 (1961)
44. S. F. Edwards. Proc. Roy. Soc. A267, 518 (1962)
45. S. F. Edwards. Adv. Phys. 16, 359 (1967)
46. L. Ballentine. Canadian J. Phys. 44, 2533 (1966)
47. R. Shaw, N. Smith. Phys. Rev. 178, 985 (1969)

48. T. Chan. L. Ballentine. Physics and Chemistry of Liquids.
Vol. 2. Gordon & Breach (1971)
49. J. Ziman. J. Phys. C2, 1704 (1969)
50. М. В. Садовский. Краткие сообщения по физике ФИАН №7, 28/1973/
Препринт ФИАН №63/1973/
51. М. В. Садовский. ЖЭТФ 66, 1720/1974/
52. М. В. Садовский. Краткие сообщения по физике ФИАН №8, 18/1974/
53. Р. Кубо. В сб. Термодинамика необратимых процессов. ИЛ 1962.
54. L. Friedman. J. Non-Crystalline Solids 6, 329 (1971)
55. H. Fukuyama. E. Ebisawa. Y. Wada. Progr. Theor. Phys. 42, 494 (1969)
56. J. Ziman. Adv. Phys. 16, 551 (1968)
57. J. Ziman. J. Phys. C1, 1532 (1968)
58. S. Kirkpatrick. Rev. Mod. Phys. 45, 574 (1973)
59. M. H. Cohen. J. Jortner. Phys. Rev. Lett. 30, 696, 699 (1973)
60. N. F. Mott. Phil. Mag. 29, 613 (1974)
61. V. Ambegaokar. B. Halperin. J. Langer. Phys. Rev. B4, 385 (1971)
62. М. В. Садовский. Препринт ФИАН №153/1973/
63. Д. Лайнс. Ф. Нозьер. Теория квантовых жидкостей. "Мир" 1967.
64. Физика простых жидкостей т. 2. Экспериментальные исследования. "Мир" 1973.
65. Р. Фейнман. А. Хиббс. Квантовая механика и интегралы по траекториям. "Мир" 1968.
66. S. F. Edwards. Y. B. Gulyaev. Proc. Phys. Soc. 83, 495 (1967)
67. R. Jones. T. Lukes. Proc. Roy. Soc. A309, 457 (1969)
68. R. Kubo. J. Phys. Soc. Japan. 17, 1100 (1962)
69. G. Busch. H. Guntherodt. Phys. Kondens. Materie 6, 325 (1967)
70. Н. Н. Боголюбов. Квазисредние в задачах статистической механики. Препринт ОИЯИ Р-1451/1963/
71. С. М. Рытов. Статистическая радиофизика. "Наука" 1966.
72. Л. В. Келдыш. Диссертация. ФИАН/1965/
73. А. Л. Эфрос. ЖЭТФ 59, 880/1970/

74. Л. А. Пастур. УМН 28, 3/1973/
75. А. Н. Козлов. Л. А. Максимов. ЖЭТФ 48, 1184/1965/
76. D. Jerome. T. M. Rice. W. Kohn. Phys. Rev. 158, 462 (1967)
77. А. А. Абрикосов. С. Д. Бенеславский. ЖЭТФ 59, 1280/1970/
78. J. Zittarz. Phys. Rev. 164, 757 (1967)
79. А. А. Абрикосов. Л. П. Горьков. ЖЭТФ 39, 1781/1960/
80. E. Lieb. D. Mattis. Mathematical Physics in One Dimension.
Academic Press. 1966.
81. W. A. Little. Phys. Rev. 134, A1416, (1964)
82. I. F. Shchegolev. Phys. Stat. Sol. (a) 12, 9 (1972)
83. H. R. Zeller. Festkörperprobleme 13, 31 (1973)
84. L. B. Coleman. M. J. Cohen. D. J. Sandman. F. G. Yamagishi.
A. F. Garito. A. J. Heeger. Sol. St. Comm. 12, 1125 (1973)
85. Р. Найерлс. Квантовая теория твердых тел. ИЛ 1956.
86. R. Comes. M. Lambert. H. Launois. H. R. Zeller. Phys. Rev. B8, 571 (1973)
87. R. Comes. M. Lambert. H. R. Zeller. Phys. Stat. Sol. (b) 58, 587 (1973)
88. B. Renker. H. Rietschel. L. Pintschovius. W. Glaser. P. Bruesch.
D. Kuse. M. J. Rice. Phys. Rev. Lett. 30, 1144 (1973)
89. B. Renker. L. Pintschovius. W. Glaser. H. Rietschel. R. Comes.
L. Liebert. W. Drexel. Phys. Rev. Lett. 32, 836 (1974)
90. M. J. Cohen. L. B. Coleman. A. F. Garito. A. J. Heeger. Preprint (1974)
Phys. Rev. B10, 1298 (1974)
91. J. Ferraris. D. Cowan. V. Walatka. J. Perlstein. J. Am. Chem. Soc.
95, 948 (1973)
92. D. Schafer. F. Wudl. G. Thomas. J. Ferraris. D. Cowan. Sol. St. Comm.
14, 347 (1974)
93. A. Bloch. J. Ferraris. D. Cowan. T. Poehler. Sol. St. Comm. 13, 753 (1973)
94. S. K. Khanna. E. Ehrenfreund. A. F. Garito. A. J. Heeger. Preprint (1974)
Phys. Rev. B10, 2205 (1974)
95. A. A. Bright. A. F. Garito. A. J. Heeger. Sol. St. Comm. 13, 943 (1973)
96. A. A. Bright. A. F. Garito. A. J. Heeger. Preprint (1974)
Phys. Rev. B10, 1328 (1974)

97. C. Chu, J. Harper, T. Geballe, R. Greene. Phys. Rev. Lett. 31,
1491 (1973)
98. E. F. Skelton, A. Bloch, J. Ferraris, D. Cowan. Phys. Lett. 47A,
31 (1974)
99. R. Craven, M. Salamon, G. DePasquali, R. Herman, G. Stucky,
A. Shultz. Phys. Rev. Lett. 32, 769 (1974)
100. H. Frochlich. Proc. Roy. Soc. A223, 296 (1954)
101. C. G. Kuper. Proc. Roy. Soc. A227, 214 (1955)
102. M. J. Rice, S. Strassler. Sol. St. Comm. 13, 125, 1931 (1973)
103. D. Allender, J. Bray, J. Bardeen. Phys. Rev. B9, 119 (1974)
104. S. Barisic. Phys. Rev. B5, 932, 941 (1972)
105. W. Kohn, D. Sherrington. Rev. Mod. Phys. 42, 1 (1970)
106. H. Rietschel. Sol. St. Comm. 13, 1859 (1973)
107. Ю. А. Бычков, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. ЖЭТФ 50,
738/1966/
108. И. Е. Дзялошинский, А. И. Ларкин. ЖЭТФ 61, 791/1971/
109. Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. ЖЭТФ 67, 397/1974/
110. Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский. ФТТ 16, 1159/1974/
111. Л. Д. Ландау. ЖЭТФ 7, 627/1937/
112. P. C. Hohenberg. Phys. Rev. 158, 383 (1967)
113. P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. Phys. Rev. Lett. #31, 462 (1973)
114. D. J. Scalapino, M. Sears, R. A. Ferrell. Phys. Rev. B6, 3409 (1972)
115. М. В. Садовский. ФТТ 16, 2504/1974/
116. M. J. Rice, S. Strassler. Sol. St. Comm. 13, 697 (1973)
117. B. Patton, L. J. Sham. Phys. Rev. Lett. 31, 631 (1973)
118. J. Bardeen. Sol. St. Comm. 13, 357 (1973)
119. S. Strassler, G. A. Toombs. Phys. Lett. 46A, 321 (1973)
120. B. Patton, L. J. Sham. Phys. Lett. 47A, 133 (1974)
121. P. W. Anderson, P. A. Lee, M. Saitoh. Sol. St. Comm. 13, 595 (1973)
122. P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. Sol. St. Comm. 14, 703 (1974)
- D. B. Tanner, C. S. Jacobsen, A. F. Garito, A. J. Heeger.
123. Phys. Rev. Lett. 32, 1301 (1974)

124. P. Bruesh, H. R. Zeller, Sol. St. Comm. I4, 1037 (1974)
125. E. Economou, M. H. Cohen, Phys. Rev. B4, 396 (1971)
126. В. Л. Березинский, ЖЭТФ 65, 1251/1973/
127. P. C. Lloyd, J. Phys. C2, 1717 (1969)
128. M. J. Rice, J. Bernasconi, J. Phys. F3, 55 (1973)
129. H. G. Schuster, Sol. St. Comm. I4, 127 (1974)
130. D. J. Thouless, J. Phys. C5, 77 (1972)
131. D. C. Mattis, W. D. Langer, Phys. Rev. Lett. 25, 376 (1970)
132. Д. В. Копаев, Р. Х. Тимеров, ЖЭТФ 63, 290/1972/
133. A. Bloch, R. Weisman, C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. 28, 753 (1972)
134. A. Bloch, C. M. Varma, J. Phys. C6, 1849 (1973)
135. R. Greene, W. A. Little, Phys. Rev. Lett. 29, 718 (1972)
136. Л. Н. Булаевский, А. В. Зворыкина, Д. С. Каримов, Р. Б. Любовский,
И. Ф. Щеголев, ЖЭТФ 62, 725/1972/
137. P. N. Sen, C. M. Varma, Bull. Am. Phys. Soc. I9, 49 (1974)