ТЕОРИЯ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМ, ИСПЫТЫВАЮЩИХ ПАЙЕРЛСОВСКИЙ ПЕРЕХОД

М. В. Садовский

Рассматривается модель квазиодномерной системы, испытывающей пайерлсовский структурный переход, основанная на одномерной модели перехода типа Гинзбурга—Ландау. Для строго одномерной системы, когда истинный переход отсутствует, получена плотность электронных состояний с псевдощелью, возникающей из-за флуктуаций ближнего порядка, соответствующего пайерлсовскому искажению решетки. Показано, что диэлектрические свойства системы оказываются промежуточными между металлами и диэлектриками. Рассматривается также роль флуктуаций ниже температуры истинного перехода, стабилизирующегося в трехмерной системе. Показано, что они приводят к образованию псевдощели в плотности состояний, поэтому измерения электронных характеристик системы не дают возможности определить точку истинного перехода.

В последнее время уделялось большое внимание экспериментальному исследованию квазиодномерных систем с проводимостью металлического типа [1, 2]. Изучение кристаллов на основе TCNQ и платиновых комплексов (типа $K_2Pt(CN)_4Br_{0.33}3H_2O$) оживило интерес к хорошо известным соображениям Пайерлса в неустойчивости одномерного металла относительно изменения периода решетки [3]. Согласно рентгеноструктурным [4, 5] и нейтронографическим данным [6], в соединении $K_2Pt(CN)_4Br_{0.33}3H_2O$ действительно происходит пайерлсовский переход так, что при температурах $T \leqslant 80°$ K происходит увеличение в 6 раз начального периода решетки, тогда как при более высоких температурах имеет место сильное смягчение частоты фононов с квазиимпульсом $\approx 2p_0$ (p_0 — импульс Ферми электронов). Весьма вероятно, что пайерлсовский переход наблюдается также в соединении TTF—TCNQ [7], хотя прямые доказательства удвоения периода в этой системе пока еще отсутствуют.

В настоящей работе мы предлагаем модельное описание систем такого типа в условиях, когда длина корреляции флуктуаций параметра порядка, соответствующего деформации решетки с новым периодом, значительно превышает межатомное расстояние. Мы рассматриваем одноэлектронный спектр и плотность состояний системы. Затем исследуется диэлектрическая проницаемость, соответствующая реакции на электрическое поле, ориентированное вдоль металлических цепочек, а также проводимость вдоль цепочек на достаточно высоких частотах. Как будет показано, свойства рассматриваемой системы оказываются промежуточными между типично металлическими и полупроводниковыми, что указывает на специфику квазиодномерных систем, где флуктуации параметра порядка вблизи точки фазового перехода второго рода крайне существенны.

Мы исходим из гамильтониана

$$H = \sum_p \xi_p a_p^+ a_p + \sum_q \omega_q b_q^+ b_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{pq} g_q a_{p+q}^+ a_p (b_q + b_{-q}^+), \tag{1}$$

где ξ_p — энергия свободных электронов, отсчитанная от уровня Ферми; ω_q — фононный спектр, g_q определяет электрон-фононное взаимодействие, a_p и b_q — электронные и фононные операторы уничтожения. Теория пайерлсовского перехода в приближении самосогласованного поля в строго одномерной системе хорошо известна [8-10]; вместе с тем известно также, что флуктуации самосогласованного поля в одномерной системе весьма существенны и в строго одномерной системе делают фазовый переход вообще невозможным [11]. Учет трехмерности реальной системы может способствовать стабилизации истинного перехода (подавление флуктуаций). Мы в основном рассматриваем модель пайерлсовского перехода, предложенную в работе Ли, Райса и Андерсона [12] и основанную на одномерной модели Гинзбурга—Ландау, детально исследованной ранее в работе [13]. Хотя истинный переход в этой модели отсутствует, при некоторой температуре $T_p \approx 1/4 T_c$ (T_c — температура перехода в приближении самосогласованного поля) становится макроскопическим радиус корреляций ближнего порядка. Нас будет интересовать область температур $T \sim T_p$, когда этот радиус достаточно велик. Если при некоторой температуре стабилизируется истинный (трехмерный) переход, т. е. возникает дальний порядок, рассмотрение следует изменить. Однако флуктуации существенны также и в окрестности истинного перехода. Соответствующие расчеты проведены в Приложении.

Вместо теории Гинзбурга—Ландау можно рассмотреть взаимодействие с мягкой фононной модой вблизи точки перехода [14], однако при этом приходится использовать конкретные модели мягкой моды, область применимости которых неясна. Для рассматриваемой задачи свободная энергия Ландау имеет вид [12]

$$F\{\psi_Q\} = a(T,\ 2p_0)\,|\psi_Q|^2 + b(T,\ 2p_0)\,|\psi_Q|^4 + c(T,\ 2p_0)(Q-2p_0)^2\,|\psi_Q|^2, \tag{2}$$

где параметр порядка $\psi_Q = g_Q < b_Q + b^+_{-Q} >$ пропорционален пайерлсовской деформации решетки. Коэффициенты разложения есть

$$\left.\begin{aligned}
&a = N_0\frac{T-T_c}{T_c}, \quad T_c = \frac{2\gamma}{\pi}E_F\exp\left\{-\frac{\omega_{2p_0}}{g^2N_0}\right\},\\
&b = N_0\left\{b_0 + (b_1-b_0)\frac{T}{T_c}\right\}\frac{1}{T_c^2}; \quad c = N_0\xi_0^2(T);\\
&\xi_0^2(T) = \frac{7\zeta(3)\,v_F^2}{16\pi^2T^2}; \quad b_0 = \frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{\pi^2}; \quad b_1 = \frac{7\zeta(3)}{16\pi^2},
\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

$\ln\gamma = C$ — постоянная Эйлера, N_0 — плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми, E_F — энергия Ферми, v_F — скорость Ферми. Учет структуры электронной зоны в приближении сильной связи несущественно меняет константы в (3) [15]. Электрон в рассматриваемой модели рассеивается в статическом поле случайных флуктуаций параметра порядка ψ_Q. Простейшая собственно-энергетическая часть одноэлектронной функции Грина имеет вид [12, 16] ($\varepsilon_n = (2n+1)\pi T$)

$$\Sigma(\varepsilon_n,\ p) = \langle\psi^2\rangle \int \frac{dQ}{2\pi}\,S(Q)\,\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{p+Q}}, \tag{4}$$

где $S(Q)$ — статический структурный фактор флуктуаций параметра порядка, пропорциональный Фурье-образу двухточечной корреляционной функции параметра порядка. Для рассматриваемой модели [12, 13]

$$\frac{1}{2}S(Q) = \frac{\xi^{-1}(T)}{(Q-2p_0)^2 + \xi^{-2}(T)} + \frac{\xi^{-1}(T)}{(Q+2p_0)^2 + \xi^{-2}(T)}, \tag{5}$$

где $\xi(T)$ — корреляционная длина флуктуаций параметра порядка (радиус корреляций ближнего порядка). При $T \approx 1/4 T_c$ длина $\xi(T)$ экспоненциально возрастает с понижением температуры [14]. Тогда, рассматривая электрон с $p \sim +p_0$, имеем

$$\Sigma(\varepsilon_n,\ p) = \langle\psi^2\rangle\,[i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\xi^{-1}(T)]^{-1} \approx \Delta^2\,\{i\varepsilon_n + \xi_p\}^{-1}, \tag{6}$$

$$\Delta^2 = \langle\psi^2\rangle, \tag{7}$$

и мы учли, что для одномерной системы $\xi_{p-2p_0} = -\xi_p$.

Приближенное равенство в (6) имеет место (поправки на конечную ширину пика $S(Q)$ малы), если выполнены условия [17]

$$\left.\begin{aligned}\xi(T) &\gg |p - p_0|^{-1},\\ v_F\xi^{-1}(T) &\ll 2\pi T.\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

Первое из условий (8) накладывает ограничение на наше рассмотрение в непосредственной окрестности уровня Ферми. При $T \sim 1/4\, T_c$, когда $\xi(T)$ велика, соответствующая область энергий крайне мала и не представляет большого интереса. По данным [5], $\xi/a\ (T=300^\circ\ \mathrm{K}) > 10^2$, где a — расстояние Pt—Pt в соединении $K_2Pt(CN)_4Br_{0.33}3H_2O$. Хотя оценки работы [12] менее благоприятны, представляется несомненным, что вблизи «перехода» $\xi(T)$ очень велика и может достигать сотен межатомных расстояний.

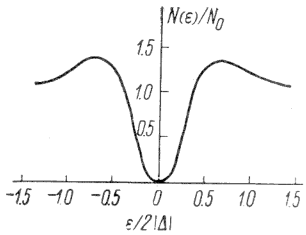

Рис. 1. Плотность электронных состояний.

Используя приближение (6) в диаграммах высших порядков, мы можем просуммировать все[1] существенные графики теории возмущений методом, предложенным в работе [17]. В работе [13] рассматривался только вклад простейшей диаграммы (6), тогда как высшие приближения весьма существенны. Выполняя суммирование, получаем [17] одноэлектронную функцию Грина в виде

$$G(\varepsilon_n, p) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \zeta\Delta^2} \equiv \langle G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n, p, p)\rangle_\zeta, \tag{9}$$

где

$$G_{\Delta^2}(\varepsilon_n, p, p) = \frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{(i\varepsilon_n)^2 + \xi_p^2 - \Delta^2} \tag{10}$$

есть нормальная функция Грина идеального пайерлсовского изолятора с энергетической щелью $2|\Delta|$. Легко убедиться, что (9) представляет собой функцию Грина электрона во внешнем поле вида $W \operatorname{Cos} 2p_0x$, амплитуда которого «флуктуирует» с распределением $P\{W\} = |W|/\Delta^2 e^{-\frac{W^2}{\Delta^2}}$. Интеграл в (9) означает усреднение по этим флуктуациям.

После обычного аналитического продолжения к действительным частотам находим плотность электронных состояний

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \left|\frac{\varepsilon}{\Delta}\right| \int_0^{\varepsilon^2/\Delta^2} d\zeta \frac{e^{-\zeta}}{\sqrt{\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} - \zeta}} = 2\left|\frac{\varepsilon}{\Delta}\right| e^{-\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2}} \operatorname{Erfi}\left(\frac{\varepsilon}{|\Delta|}\right), \tag{11}$$

где $\operatorname{Erfi} x = \int_0^x dx e^{x^2}$. Графически плотность состояний представлена на рис. 1. Мы получили плотность состояний с типичной псевдощелью с шириной порядка $|\Delta| \sim \langle\psi^2\rangle^{1/2}$. Температурная зависимость $\langle\psi^2\rangle$ рассчитана в [13]. Асимптотически

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \to 1 \text{ при } |\varepsilon| \to \infty; \quad \frac{N(\varepsilon)}{N_0} \approx 2\frac{\varepsilon^2}{\Delta^2} \to 0 \text{ при } |\varepsilon| \to 0.$$

Обращение плотности состояний в нуль посредине псевдощели нефизично, так как наше рассмотрение теряет смысл в непосредственной окрестности уровня Ферми ввиду ограничения (8). Таким образом, суммирование всех существенных диаграмм приводит, в отличие от работы [13], к существованию псевдощели не только при $T \geqslant 1/4T_c$, но и при

[1] Мы считаем, что все высшие корреляторы параметра порядка факторизуются через парные, что соответствует учету только гауссовых флуктуаций.

$T < 1/4T_c$. Истинная щель не возникает даже при низких температурах в «диэлектрической» фазе.[2] Как показано ниже, в Приложении, этот результат сохраняется даже в случае истинного фазового перехода (при $T \leqslant T_c$), поэтому измерения электронных характеристик системы, строго говоря, не дают возможности определить точку перехода.

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

$$\frac{\delta G(\varepsilon, p)}{\delta\varphi_{q\omega}} = G(\varepsilon, p)\,\Gamma(\varepsilon, p, \varepsilon+\omega, p+q)\,G(\varepsilon+\omega, p+q), \tag{12}$$

где $\Gamma(\varepsilon, p, \varepsilon+\omega, p+q)$ — соответствующая вершинная часть. В рассматриваемой модели вариационная производная (12) вычисляется непосредственно [17]. При этом получаем

$$\frac{\delta G(\varepsilon, p)}{\delta\varphi_{q\omega}} = -e\left\langle G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon, p, p)\,G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega, p+q, p+q)\right\rangle_\zeta -$$
$$- e\left\langle G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon, p, p-2p_0)\,G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon+\omega, p-2p_0+q, p+q)\right\rangle_\zeta, \tag{13}$$

где e — заряд электрона, $G_{\Delta^2}(\varepsilon, p, p)$ определена в (10), тогда как

$$G_{\Delta^2}(i\varepsilon_n, p, p-2p_0) = \frac{\Delta}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2} \tag{14}$$

представляет собой аномальную функцию Грина пайерлсовского диэлектрика, описывающую процесс переброса $p \to p - 2p_0$. Таким образом, в теории возникают средние от парных произведений аномальных функций Грина, тогда как сами аномальные функции отсутствуют в соответствии с отсутствием дальнего порядка в системе.

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

$$\Pi(q\omega_m) = -\int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} 2T\sum_n N_0\rho\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p\,\{G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_m, p, p)\,G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n+\omega_m, p+q, p+q) +$$
$$+ G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n, p, p-2p_0)\,G_{\zeta\Delta^2}(\varepsilon_n+\omega_m, p+q, p-2p_0+q)\} \equiv \left\langle \Pi_{\zeta\Delta^2}(q, \omega_m)\right\rangle_\zeta, \tag{15}$$

где $\Pi_{\Delta^2}(q, \omega_m)$ — поляризационный оператор пайерлсовского диэлектрика, ρ — плотность металлических нитей в сечении образца (мы интересуемся откликом единицы объема системы). Дальнейшее рассмотрение аналогично [17]. Диэлектрическая проницаемость вдоль металлических цепочек есть

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi(q\omega) = \left\langle \varepsilon_{\zeta\Delta^2}(q\omega)\right\rangle_\zeta, \tag{16}$$

где

$$\varepsilon_{\Delta^2}(q\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2}\Pi_{\Delta^2}(q, \omega) \tag{17}$$

— диэлектрическая проницаемость пайерлсовского диэлектрика.

Рассмотрим сначала случай $\omega = 0$. Тогда для рассматриваемой модели получаем [17]

$$\varepsilon(q, 0) \approx 1 - \frac{v_F^2\varkappa^2}{6\Delta^2}\exp\frac{v_F^2 q^2}{6\Delta^2}\,\mathrm{Ei}\left(-\frac{v_F^2 q^2}{6\Delta^2}\right), \tag{18}$$

---

[2] Учет негауссовых флуктуаций вряд ли может качественно изменить этот результат. Щель может появиться только при наличии истинного дальнего порядка.

где $\varkappa^2 = 8\pi e^2 N_0 \rho$ — квадрат обратного радиуса дебаевской экранировки, $\mathrm{Ei}(-x)$ — интегральная показательная функция. Отсюда для $v_F q \gg |\Delta|$ получаем $\varepsilon(q, 0) \approx 1 + (\varkappa^2/q^2)$. Для $v_F q \ll |\Delta|$

$$\varepsilon(q, 0) \approx 1 - \frac{v_F^2 \varkappa^2}{6\Delta^2} \ln \gamma \frac{v_F^2 q^2}{6\Delta^2}. \tag{19}$$

Такое поведение $\varepsilon(q, 0)$ является промежуточным между типично металлическим и диэлектрическим.

Перейдем к рассмотрению случая $\omega \neq 0$; $v_F q \ll |\Delta|$. Получим [17]

$$\mathrm{Re}\, \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \mathrm{Ei}\left(-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}\right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}\left\{1 - e^{-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}}\right\}, \tag{20}$$

где $\omega_p^2 = v_F^2 \varkappa^2$ — квадрат плазменной частоты.

При $\omega \gg 2|\Delta|$ $\mathrm{Re}\, \varepsilon(\omega) \approx 1 - (\omega_p^2/\omega^2)$. При $\omega \ll 2|\Delta|$

$$\mathrm{Re}\, \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6\Delta^2} \ln \gamma \frac{\omega^2}{4\Delta^2}. \tag{21}$$

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

$$\mathrm{Re}\, \sigma(\omega) = \frac{\omega}{4\pi} \mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega). \tag{22}$$

Аналогично [17] имеем

$$\mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) = \frac{\pi}{2} \omega_p^2 \frac{|\Delta|}{\omega^3} \int_0^{\frac{\omega^2}{4\Delta^2}} d\zeta e^{-\zeta} \frac{\zeta}{\sqrt{\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - \zeta}} =$$

$$= \pi \omega_p^2 \frac{|\Delta|}{\omega^3} e^{-\frac{\omega^2}{4\Delta^2}} \left\{\frac{\omega^2}{4\Delta^2} - \frac{d}{d\alpha}\right\} \mathrm{Erfi}\left(\sqrt{\alpha}\, \frac{\omega}{2|\Delta|}\right)\Bigg|_{\alpha=1}. \tag{23}$$

Асимптотически получим

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) &\approx \pi \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2 \left(\frac{\Delta}{\omega}\right)^2, \\ \mathrm{Re}\, \sigma(\omega) &\approx \frac{1}{4} \left(\frac{\Delta}{\omega}\right)^2 \frac{\omega_p^2}{\omega} \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

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

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) &\approx \frac{\pi}{12} \frac{\omega_p^2}{\Delta^2}, \\ \mathrm{Re}\, \sigma(\omega) &\approx \frac{1}{48} \left(\frac{\omega_p}{\Delta}\right)^2 \omega \to 0 \quad \text{при} \quad \omega \to 0. \end{aligned}\right\} \tag{25}$$

Таким образом, статическая проводимость в нашем приближении обращается в нуль. Аналогичным образом равна нулю и статическая проводимость пайерлсовского диэлектрика при температуре, равной нулю. Выражение (23) описывает своего рода межзонное поглощение (рис. 2). Максимум поглощения имеет место при $\omega \sim 2|\Delta|$. Вместе с тем видно, что наша модель описывает вещество, промежуточное между металлом и диэлектриком: в металле $\mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) \sim 1/\omega$ при $\omega \to 0$, а в диэлектрике $\mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) = 0$ при $\omega = 0$. В нашем случае $\mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega)$ при $\omega = 0$ имеет конечный разрыв

$$(\mathrm{Im}\, \varepsilon(\omega) = -\mathrm{Im}\, \varepsilon(-\omega)).$$

Отметим, что полученные выше формулы, строго говоря, неприменимы в области малых частот ввиду того, что все рассмотрение несправедливо вблизи уровня Ферми в смысле первого из условий (8). Проведенное вычисление поляризационного оператора справедливо лишь для

$$\omega \gg v_F \xi^{-1}(T). \tag{26}$$

Это условие имеет ясный смысл — за характерное время изменения внешнего поля электрон перемещается на расстояние, меньшее $\xi(T)$.

Итак, пайерлсовская система, по-видимому, представляет собой вещество, промежуточное по свойствам между металлом и диэлектриком. Поиски пика поглощения на частотах, соответствующих ширине псевдощели, представляют большой экспериментальный интерес. Возможность аномального поведения $\varepsilon(\omega)$ (21), (25) при $\omega \leqslant 2|\Delta|$ подчеркивает значение экспериментов в радиочастотном диапазоне. В настоящее время надежные экспериментальные данные неизвестны.

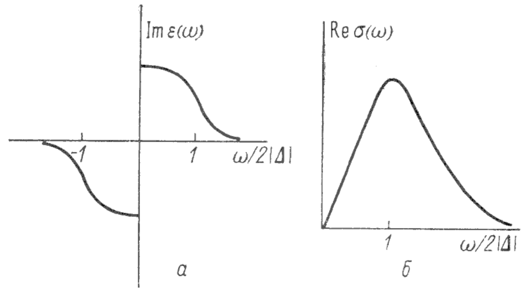

Рис. 2. Качественное поведение мнимой части диэлектрической проницаемости (*а*) и действительной части проводимости (*б*) как функции частоты внешнего поля.

В заключение автор выражает благодарность Л. В. Келдышу, Л. Н. Булаевскому и Д. И. Хомскому за многочисленные обсуждения и замечания.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В строго одномерной системе фазовый переход невозможен ввиду разрушающего влияния флуктуации [11]. В частности, приближение самосогласованного поля не имеет области применимости ввиду большой ширины критической области $\Delta T/T_c \sim 1$ [13]. Однако ввиду трехмерности реальных систем флуктуации могут быть по какой-либо причине подавлены (например, амплитуда флуктуаций может быть ограничена дальнодействующим кулоновским взаимодействием электронов соседних цепочек). Тогда в системе возможен истинный фазовый переход при $T = T_c$. Именно этот случай, по-видимому, реализуется в $K_2Pt(CN)_4Br_{0.33}3H_2O$ [4], где истинный (трехмерный) переход стабилизируется при $T_c \leqslant 80°$ K. Тогда при $T < T_c$ возникает дальний порядок и систему с неплохой точностью можно описывать в приближении самосогласованного поля. Однако флуктуации параметра порядка хотя и подавлены, все же могут оказаться существенными даже при $T < T_c$. В этом случае [13]

$$\psi_Q = \Delta + \delta\psi_Q, \tag{П, 1}$$

где

$$\Delta = \left(-\frac{a}{2b}\right)^{1/2} = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{8\pi^2 T_c}{7\zeta(3)}}\sqrt{T_c - T} & \text{при} \quad T \leqslant T_c, \\ \dfrac{\pi}{\gamma} T_c & \text{при} \quad T = 0 \end{cases} \tag{П, 2}$$

— равновесное значение параметра порядка, $\delta\psi_Q$ — его флуктуации. Δ играет роль когерентного поля, передающего импульс $2p_0$ и приводящего к брэгговскому рассеянию электронов на границах новой зоны Бриллюэна; $\delta\psi_Q$ — случайное поле. В диаграммной технике возникают два типа линий взаимодействия: линии когерентного поля Δ, передающие импульс $2p_0$, и линии случайного поля, которым сопоставляется коррелятор $\langle\delta\psi_Q\delta\psi_{-Q}\rangle = \langle\delta\psi^2\rangle S(Q)$. При этом $S(Q)$ снова имеет вид (5) [13]. Формулы приближения самосогласованного поля для $\langle\delta\psi^2\rangle$ и $\xi(T)$ работы [13] теперь, вообще говоря, неприменимы (ввиду трехмерного характера критических флуктуаций), так что $\langle\delta\phi^2\rangle$ и $\xi(T)$ рассматриваются далее как параметры теории. Вблизи точки перехода $(T \leqslant T_c)$ $\xi(T)$ растет так, что мы снова можем использовать приближение типа (6)—(8). Тогда и линии случайного поля передают импульс $2p_0$. В разложении одноэлектронной функции Грина доминирует последовательность чередующихся гриновских фукций $\{i\varepsilon_l - \xi_p\}^{-1}$ и $\{i\varepsilon_l + \xi_p\}^{-1}$. В n-м порядке теории возмущений имеется $2n$ вершин, из которых $2k$ вершин соединено линиями случайного поля флуктуаций, которым сопоставляются множители $\delta\Delta^2 = \langle\delta\phi^2\rangle$, тогда как в $2(n-k)$ вершин вставлены одиночные линии когерентного рассеяния, каждой из которых сопоставляется множитель Δ. Тогда разложение функции Грина имеет вид

$$G(\varepsilon_l, \xi_p) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{n} B_n^k(\varepsilon_l, \xi_p), \tag{П, 3}$$

где

$$B_n^k = |\Delta|^{2(n-k)} \left[\frac{n!}{k!(n-k)!}\right]^2 |\delta\Delta|^{2k} k! \{i\varepsilon_l - \xi_p\}^{-n} \{i\varepsilon_l + \xi_p\}^{-n} \{i\varepsilon_l - \{\xi_p\}^{-1}. \tag{П, 4}$$

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 остающиеся k вершин; $[n!/k!(n-k)!]^2$ — 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 $2p_0$ «входит», тогда как в другой половине «выходит». Используем тождество $(1+x)^n(1+y)^n = \sum_{k_1 k_2 = 0}^{n} x^{k_1} y^{k_2} C_n^{k_1} C_n^{k_2}$, где положим

$$x = \zeta \frac{\delta\Delta}{\Delta} = |\zeta| e^{i\varphi} \frac{\delta\Delta}{\Delta}; \quad y = x^*;$$

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \left(1 + \zeta \frac{\delta\Delta}{\Delta}\right)^n \left(1 + \zeta^* \frac{\delta\Delta}{\Delta}\right)^n = \sum_{k=0}^{n} [C_n^k]^2 |\zeta|^{2k} \left(\frac{\delta\Delta}{\Delta}\right)^{2k}.$$

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

$$G(\varepsilon_l, \xi_p) = \int_0^\infty d|\zeta|^2 e^{-|\zeta|^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2\left[1 + |\zeta|^2 \left(\frac{\delta\Delta}{\Delta}\right)^2 + 2|\zeta| \frac{\delta\Delta}{\Delta}\cos\varphi\right]} =$$
$$= \frac{1}{\pi} \int d^2\zeta e^{-|\zeta|^2} \frac{i\varepsilon_l + \xi_p}{(i\varepsilon_l)^2 - \xi_p^2 - \Delta^2 \left|1 + \zeta \frac{\delta\Delta}{\Delta}\right|^2}, \tag{П, 5}$$

где

$$\int d^2\zeta \ldots \equiv \int d\,\mathrm{Re}\,\zeta\, d\,\mathrm{Im}\,\zeta \ldots = \int_0^\infty d|\zeta||\zeta| \int_0^{2\pi} d\varphi \ldots$$

Мы получили нормальную функцию Грина со щелью, «флуктуирующей» вблизи Δ, задаваемой формулами (П, 2). Выражение для аномальной функции Грина очевидно. При $\Delta \to 0$ (П, 5) переходит в (9), а при $\delta\Delta \to 0$ получаем (10), т. е. идеальный пайерлсовский диэлектрик; при $T \geqslant T_c$ поэтому справедливо рассмотрение, проведенное выше. Очевидно, что и при $T \leqslant T_c$ флуктуации $\delta\Delta$ крайне существенны. Для плотности состояний имеем

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = \frac{|\varepsilon|}{\pi} \int d^2\zeta e^{-|\zeta|^2} \frac{\Theta\left[\varepsilon^2 - \Delta^2 \left|1 + \zeta \frac{\delta\Delta}{\Delta}\right|^2\right]}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 \left|1 + \zeta \frac{\delta\Delta}{\Delta}\right|^2}}. \tag{П, 6}$$

Опуская громоздкие детали, укажем только, что при $\delta\Delta \to 0$ (т. е. $T \to 0$)

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \to \begin{cases} \dfrac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2}} & \text{при } |\varepsilon| > \Delta, \\ 0 & \text{при } |\varepsilon| < \Delta, \end{cases} \tag{П, 7}$$

т. е. получаем идеальный диэлектрик с запрещенной зоной 2Δ. При конечном $\delta\Delta$ всегда $N(\varepsilon)/N_0 \neq 0$ при $|\varepsilon| < \Delta$.

Например, при $|\varepsilon| \to 0$ имеем

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{|\varepsilon|}{|\delta\Delta|} \cdot 1.68 \left\{1 - \mathrm{Erfc}\left(\frac{1}{2}\left|\frac{\Delta}{\delta\Delta}\right|\right)\right\}, \tag{П, 8}$$

где $\mathrm{Frfc}\, x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int\limits_0^x dx e^{-x^2}$. При $|\varepsilon| = \Delta$ получаем $N(|\varepsilon| = \Delta)/N_0 \approx \sqrt{\frac{\Delta}{|\delta\Delta|}}$.

Таким образом, опять получаем плотность состояний с псевдощелью. Естественно, что при $|\delta\Delta| \ll \Delta$ плотность состояний в запрещеной зоне мала. Однако при $T \leqslant T_c$ это, вообще говоря, не так. Мы видим, что флуктуации параметра порядка крайне существенны и в случае истинного фазового перехода. В окрестности перехода плотность состояний имеет псевдощель как при $T \geqslant T_c$, так и при $T \leqslant T_c$. В этом смысле точка перехода вообще не выделена и не может быть определена по измерениям электронных характеристик системы. Флуктуации оказываются аналогичными по своему влиянию внутренней неупорядоченности системы, рассмотренной ранее в [18]: они подавляют истинный переход и «размывают» его влияние на электронные свойства.

Литература

[1] I. F. Shchegolev. Phys. Stat. Sol., (a) *12*, 9, 1972.
[2] H. R. Zeller. Festkörperprobleme, Bd. XIII, 31, 1973.
[3] Р. Пайерлс. Квантовая теория твердых тел. ИЛ, М., 1956.
[4] R. Comes, M. Lambert, H. R. Zeller. Phys. Stat. Sol. (b), *58*, 587, 1973.
[5] R. Comes, M. Lambert, H. Launois, H. R. Zeller. Phys., Rev. *B8*, 571, 1973.
[6] B. Renker, H. Rietschel, L. Pintschovius, W. Gläser, P. Brüesch, D. Kuse, M. J. Rice. Phys. Rev. Lett. *30*, 1144, 1973.
[7] L. B. Coleman, M. J. Cohen, D. J. Sandman, F. G. Yamagishi, A. F. Garito, A. J. Heeger. Sol. St. Comm., *12*, 1125, 1973.
[8] H. Fröhlich. Proc. Roy. Soc., *A223*, 296, 1954.
[9] C. G. Kuper. Proc. Roy. Soc., *A227*, 214, 1955.
[10] M. J. Rice, S. Strässler. Sol. St. Comm. *13*, 125, 1931, 1973.
[11] P. C. Hohenberg. Phys. Rev., *158*, 383, 1967.
[12] P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. Phys. Rev. Lett., *31*, 462, 1973.
[13] D. J. Scalapino, M. Sears, R. Ferrel. Phys. Rev., *B6*, 3409, 1972.
[14] M. J. Rice, S. Strässler. Sol. St. Comm., *13*, 1389, 1973.
[15] D. Allender, J. Bray, J. Bardeen, Phys. Rev., *B9*, 119, 1974.
[16] S. F. Edwards. Phil. Mag., *6*, 617, 1961.
[17] М. В. Садовский. ЖЭТФ, *66*, 1720, 1974.
[18] Л. Н. Булаевский, М. В. Садовский. ФТТ *16*, 1159, 1974.

Примечание при корректуре. В недавней работе (D. B. Tanner. Phys. Rev. Lett., *32*, 1303, 1974) приводятся экспериментальные данные по инфракрасному поглощению в TTF=TCNQ при 65 и 320° K, имеющие качественно вид, аналогичный рис. 2, *б*, причем $\mathrm{Re}\,\sigma\,(\omega = 2\,|\Delta|) \simeq 5 \cdot 10^2 \div 10^3$ ом$^{-1}\cdot$см$^{-1}$. Экстраполируя (25) к $\omega = 2\,|\Delta|$ и используя экспериментальные значения $2\,|\Delta| = 0.14$ эв, $\omega_p = 1.2$ эв, получим $\mathrm{Re}\,\sigma\,(\omega = 2\,|\Delta|) \simeq 8 \cdot 10^2$ ом$^{-1}\cdot$см$^{-1}$.

Физический институт
им. П. Н. Лебедева АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
26 февраля 1974 г.