

## ОБ ОДНОЙ МОДЕЛИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ (К ТЕОРИИ «ЖИДКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ»)

М. В. Садовский

Предлагается модель электронных свойств неупорядоченных систем типа «жидких полупроводников». Получена одноэлектронная функция Грина, приводящая к плотности состояний с характерной «псевдощелью» в области энергий, соответствующей запрещенной зоне кристалла. Рассматриваются диэлектрические свойства, проводимость и оптическое поглощение. Получена локализация электронов «брэгговского» типа и аналог межзонного поглощения в идеальном полупроводнике. Диэлектрические свойства рассматриваемой модели оказываются промежуточными между типичными металлами и диэлектриками. Отмечается возможность применения полученных результатов для интерпретации свойств квазиодномерных систем (типа TTF — TCNQ) вблизи точки пайерлсовского структурного перехода.

### Введение

В последние годы возрос интерес как к теории, так и к экспериментальным исследованиям электронных свойств различных неупорядоченных систем [1]. В частности, большое внимание уделялось экспериментальному изучению расплавов большинства известных полупроводников (см. обзоры [2-4]). Оказалось, что по своим кинетическим свойствам в жидком состоянии полупроводники могут быть приблизительно разделены на три группы.

К первой относятся вещества типа Ge, InSb и других  $A_{III}B_V$ , которые при переходе в жидкое состояние дают расплавы с чисто металлическими свойствами. По-видимому, это связано с тем, что при плавлении в этих веществах происходит разрушение не только дальнего, но и ближнего порядка, соответствующего данному кристаллу. Вторую группу образуют вещества типа PbTe, SnTe, PbSe, In<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Ga<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> и другие, представляющие собой в кристаллическом состоянии типичные полупроводники. При плавлении их электропроводность по абсолютной величине и температурному ходу сохраняет практически то же поведение, что и в соответствующем кристалле. Знак термоэдс, как правило, свидетельствует о проводимости  $p$ -типа. Однако, по эффекту Холла, они проявляют типично металлические свойства: константа Холла почти не зависит от температуры, знак ее соответствует проводимости  $n$ -типа, а по абсолютной величине она несколько превышает значение для металла с двумя свободными электронами на атом. Эти вещества, именуемые обычно «жидкими полупроводниками», образуют, таким образом, группу, промежуточную между типичными металлами и полупроводниками. Их свойства, по всей видимости, могут быть рассмотрены в рамках приближения почти свободных электронов с учетом сильного рассеяния «брэгговского» типа в области энергий, совпадающей с запрещенной зоной соответствующего кристалла. Наконец, третью группу образуют вещества типа GeS, SnS и другие с очень низкой электронной подвижностью, которые следует, по-видимому, рассматривать в приближении сильной связи электронов с ионами.

В настоящей работе предлагается простая модель, которая позволяет качественно понять возникновение своего рода «зонной структуры» в энергетическом спектре веществ второй группы, проявляющейся в виде характерной «псевдощели» в плотности электронных состояний типа предполагаемой в работах Мотта и других авторов [1]. Рассматриваются также диэлектрические свойства, высокочастотная проводимость и оптическое поглощение. «Квазиодномерный» характер модели позволяет надеяться, что значительная часть полученных ниже результатов может быть применена для описания свойств одномерных систем, находящихся вблизи точки пайерлсовского структурного перехода (типа TTF — TCNQ).

### 1. Одноэлектронная функция Грина

Гамильтониан взаимодействия электрона с ионами жидкости запишем в виде

$$H_{int} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{q}} \langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{p}} \rho_{\mathbf{q}}, \quad (1.1)$$

где

$$\rho_{\mathbf{q}} = \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i}$$

— фурье-компонента плотности ионов ( $\mathbf{R}_i$  — положение ионов,  $N$  — их полное число),  $\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle$  — матричный элемент ионного псевдопотенциала, вообще говоря нелокального [5],  $a_{\mathbf{p}}^+$  и  $a_{\mathbf{p}}$  — электронные операторы вторичного квантования.

Введем одноэлектронную функцию Грина в температурной технике Мацубары:

$$G(\mathbf{p}\tau) = -\langle T_{\tau} a_{\mathbf{p}}(\tau) a_{\mathbf{p}}^+(0) \rangle, \quad (1.2)$$

а также функцию Грина ионной подсистемы

$$F(\mathbf{q}\tau) = -\langle T_{\tau} \rho_{\mathbf{q}}(\tau) \rho_{\mathbf{q}}^+(0) \rangle. \quad (1.3)$$

Для фурье-образа (1.3) имеем спектральное представление [6]

$$F(\mathbf{q}\omega_m) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{A(\mathbf{q}\omega')}{i\omega_m - \omega'}, \quad (1.4)$$

где  $\omega_m = 2\pi mT$  ( $T$  — температура),

$$A(\mathbf{q}\omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} \exp\left[-\frac{E_n}{T}\right] |(\rho_{\mathbf{q}})_{mn}|^2 \left\{ 1 - \exp\left[-\frac{\omega_{mn}}{T}\right] \right\} \delta(\omega - \omega_{mn}), \quad (1.5)$$

$$\omega_{mn} = E_m - E_n, \quad (\rho_{\mathbf{q}})_{mn} = \langle m | \rho_{\mathbf{q}} | n \rangle, \quad Z = \sum_m \exp\left[-\frac{E_m}{T}\right],$$

$m, n$  нумеруют точные уровни ионной подсистемы.

Далее вводим динамический формфактор жидкости [7]

$$S(\mathbf{q}\omega) = Z^{-1} \sum_{m,n} |(\rho_{\mathbf{q}})_{mn}|^2 \exp\left[-\frac{E_n}{T}\right] \delta(\omega - \omega_{mn}). \quad (1.6)$$

Сравнивая (1.5) и (1.6), видим, что

$$A(\mathbf{q}\omega) = S(\mathbf{q}\omega) \{1 - e^{-\omega/T}\}. \quad (1.7)$$

Простейший вклад в электронную собственно-энергетическую часть имеет вид

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \frac{T}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} |\langle \mathbf{p} + \mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 \sum_m F(\mathbf{q} \omega_m) \frac{1}{i\varepsilon_n + i\omega_m - \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}}, \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_n = (2n+1)\pi T, \quad \xi_p = p^2/2m - \mu.$$

Заметим, что характерные энергии ионных возбуждений (частоты, на которых отличен от нуля  $S(\mathbf{q}\omega)$ ) удовлетворяют в жидкости условию  $\omega/T \ll 1$ , тогда как электронный спектр интересует нас в существенно более широком интервале энергий  $\geq T$ . Это позволяет пренебречь влиянием динамики ионной подсистемы, т. е. учесть в (1.6) только члены с  $m=n$ :

$$\frac{1}{N} S(\mathbf{q}\omega) \approx S(\mathbf{q}) \delta(\omega), \quad (1.9)$$

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega S(\mathbf{q}\omega), \quad (1.10)$$

где  $S(\mathbf{q})$  — статический структурный фактор жидкости [7]. Используя (1.4) — (1.7), (1.9) в (1.8), получаем статическое приближение

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) \approx \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} |\langle \mathbf{p} + \mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 S(\mathbf{q}) \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_{\mathbf{p} + \mathbf{q}}}. \quad (1.11)$$

Это приближение применялось Эдвардсом в его известных работах [8]. Использованное там усреднение по всевозможным ионным конфигурациям неявно содержится в определениях (1.5) и (1.6), где производится усреднение по каноническому ансамблю жидкости.

Статический структурный фактор  $S(\mathbf{q})$  экспериментально определяется из данных по упругому рассеянию рентгеновских лучей или нейтронов. Его типичное поведение в жидкости представлено на рис. 1.

Рассмотрим сначала одномерную модель жидкости. Структурный фактор будем моделировать двумя узкими пиками при  $q = \pm K$ , что является естественным аналогом рис. 1 в одномерном случае. Мы предположим, что уровень Ферми свободных электронов проходит через точки вырождения их спектра, в которых образуются брэгговские разрывы в случае идеальной периодической структуры (см. рис. 2). Поэтому мы принимаем  $2p_F = K$ , где  $p_F$  — импульс Ферми свободных электронов. Последнее условие типично для «жидких полупроводников» [4],  $K$  при этом аналог вектора обратной решетки идеального кристалла.

Из (1.11) имеем ( $L$  — длина системы)

$$\Sigma(\varepsilon_n p) = \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q) \{i\varepsilon_n - \xi_{p+q}\}^{-1} \approx$$

$$\approx A^2 \{i\varepsilon_n - \xi_{p-K}\}^{-1} + A^2 \{i\varepsilon_n - \xi_{p+K}\}^{-1}, \quad (1.12)$$

$$A^2 = \frac{L}{N} \int \frac{dq}{2\pi} |\langle p+q | V | p \rangle|^2 S(q). \quad (1.13)$$

Мы воспользовались здесь характерной структурой  $S(q)$  с двумя узкими пиками при  $q = \pm K$ .

Нетрудно убедиться [9], что поправки на конечную ширину пиков малы, если выполнены условия

$$\gamma \equiv \frac{1}{R_c} \ll |p - p_F| \quad \text{или} \quad v_F \gamma \ll 2\pi T, \quad (1.14)$$

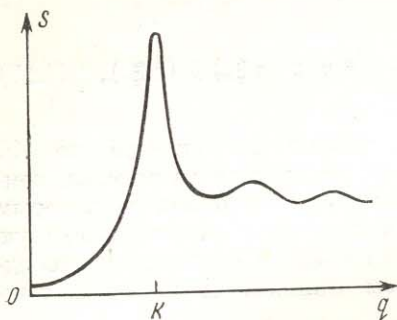


Рис. 1

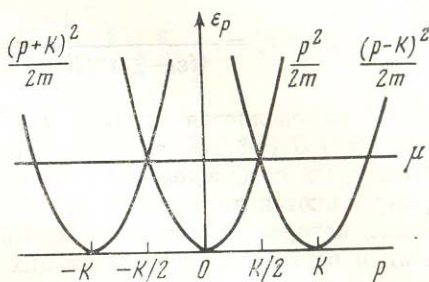


Рис. 2

где  $\gamma$  — ширина пиков;  $v_F$  — скорость Ферми свободных электронов; параметр  $R_c$ , определенный в (1.14), играет в одномерном случае роль радиуса корреляций ближнего порядка.

Из рис. 2 видны следующие свойства симметрии спектра свободных электронов в одномерном случае:

$$\xi_{p-K} = -\xi_p \text{ при } p \sim +K/2 \tag{1.15}$$

$$\xi_{p+K} = -\xi_p \text{ при } p \sim -K/2.$$

Тогда, рассматривая электрон с  $p \sim +K/2$  (рассмотрение  $p \sim -K/2$  аналогично), мы можем учитывать только первое слагаемое в правой части (1.12):

$$\Sigma(\epsilon_n, \xi_p) = A^2 G_0(\epsilon_n; -\xi_p). \tag{1.16}$$

Таким образом, использование характерного вида структурного фактора жидкости позволяет заменить реальное взаимодействие в жидкости  $|\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q)$  на модельное  $2\pi N L^{-1} A^2 \delta(q-K)$ . При этом оставшееся возмущение

$$\bar{A}^2(q) = |\langle p+q|V|p \rangle|^2 S(q) - 2\pi N L^{-1} A^2 \delta(q-K)$$

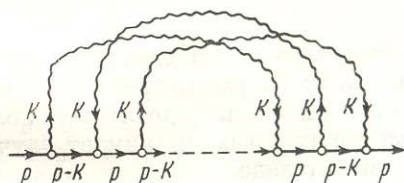


Рис. 3

несущественно, если рассмотрение ограничивается областью, задаваемой условиями (1.14). Следует подчеркнуть, что введение такого модельного взаимодействия не означает введения дальнего кристаллического порядка. Рассмотрение ведется в предположении макроскопически однородной жидкости, а условия (1.14) накладывают ограничение в смысле достаточной величины радиуса корреляций ближнего порядка. Присутствие дальнего порядка влечет появление «аномальных» функций Грина, описывающих процессы переброса [10] и существенно меняющих структуру уравнений.

С введенным выше модельным взаимодействием мы можем теперь просуммировать все существенные диаграммы. Нетрудно видеть [9], что в каждом порядке теории возмущений одинаковый вклад дают диаграммы с чередующейся последовательностью гриновских функций  $\{i\epsilon_n - \xi_p\}^{-1}$  и  $\{i\epsilon_n + \xi_p\}^{-1}$  (мы рассматриваем  $p \sim K/2$ ) и чередующейся последовательностью вершин с входящими или выходящими линиями взаимодействия, передающими импульс  $\pm K$  (см. рис. 3). Общий член разложения для

Функции Грина тогда имеет вид

$$g_n(\varepsilon_i p) = \frac{A^{2n} n!}{(i\varepsilon_i - \xi_p)^n (i\varepsilon_i + \xi_p)^n (i\varepsilon_i - \xi_p)} = n! z^n(\varepsilon_i \xi_p) G_0(\varepsilon_i \xi_p), \quad (1.17)$$

где  $A^2$  определяется (1.13),  $n$  — порядок теории возмущений по  $A^2$ ,  $z(\varepsilon_i \xi_p) = A^2 G_0(\varepsilon_i \xi_p) G_0(\varepsilon_i; -\xi_p)$ . 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

$$\sum_{n=0}^{\infty} n! z^n = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (\zeta z)^n = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{1}{1-\zeta z}. \quad (1.18)$$

Тогда одноэлектронная функция Грина есть

$$G(\varepsilon_i p) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\varepsilon_i p) = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \frac{i\varepsilon_i + \xi_p}{(i\varepsilon_i)^2 - \xi_p^2 - \zeta A^2} \equiv \langle G_{\tau A^2}(\varepsilon_i p p) \rangle_{\tau}, \quad (1.19)$$

где

$$G_{A^2}(\varepsilon_i p p) = \frac{i\varepsilon_i + \xi_p}{(i\varepsilon_i)^2 - \xi_p^2 - A^2} \quad (1.20)$$

представляет собой нормальную функцию Грина идеального полупроводника с энергетической щелью  $2|A|$ ,

$$\langle \dots \rangle_{\tau} = \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} \dots$$

— своего рода усреднение по «флуктуациям» энергетической щели. Таким образом, рассматриваемая модель неупорядоченной системы эквивалентна ансамблю идеальных полупроводников, энергетическая щель в спектре которых принимает случайные значения с распределением специального вида.

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

$$N(\varepsilon) = -\frac{N_0}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon \xi_p), \quad (1.21)$$

где  $N_0$  — плотность состояний свободных электронов. Из (1.19) имеем

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} G^{R,A}(\varepsilon, \xi_p) &= \mp \pi \int_0^{\infty} d\zeta e^{-\zeta} (\varepsilon + \xi_p) \delta(\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \zeta A^2) = \\ &= \mp \frac{\pi}{A^2} (\varepsilon + \xi_p) \theta(\varepsilon^2 - \xi_p^2) e^{-(\varepsilon^2 - \xi_p^2)/A^2} \end{aligned} \quad (1.22)$$

плотности состояний в сравнении со случаем свободных электронов. Займаном [13] 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 (1.12). Не отрицая такой возможности, мы хотим отметить, что эти предположения представляются слишком жесткими, тем более что в настоящее время не существует теоретических или экспериментальных методов, позволяющих найти вышеионные корреляторы в жидкости. Между тем оказывается достаточным наложить только одно условие на ионный псевдопотенциал (существенно основанное на его нелокальности), чтобы получить в трехмерном случае результат типа (1.16). Матричный элемент  $\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle$  нелокального псевдопотенциала зависит не только от  $|\mathbf{q}|$ , но в общем случае и от  $|\mathbf{p}|$  и  $|\mathbf{p}+\mathbf{q}|$ , т. е. и от взаимной ориентации векторов  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{q}$  [5]. При этом оказывается, что в интересующей нас области  $|\mathbf{q}| \sim 2p_F$  псевдопотенциал, соответствующий рассеянию «почти назад», существенно больше, чем для рассеяния на меньшие углы [5, 12].

Типичная зависимость матричного элемента  $\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle$  ( $|\mathbf{p}| \sim p_F$ ,  $|\mathbf{q}| \approx 2p_F$ ) от угла рассеяния показана на рис. 5. Мы предположим, что для интересующих нас веществ имеется ярко выраженный пик псевдопотенциала в области углов рассеяния  $\theta \sim \pi$ . Тогда из (1.11) получаем ( $\Omega_0$  — объем, приходящийся на один атом)

$$\Sigma(\varepsilon_n \mathbf{p}) = \Omega_0 \int_0^\infty dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{d \cos \theta |\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 S(\mathbf{q})}{i\varepsilon_n - \xi_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}} \approx A^2 \{i\varepsilon_n - \xi_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|}\}^{-1}, \quad (1.25)$$

и задача сводится к одномерной. Здесь

$$A^2 = \Omega_0 \int_0^\infty dq q^2 \frac{1}{4\pi^2} \int_{-1}^1 d \cos \theta |\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 S(\mathbf{q}). \quad (1.26)$$

Мы предполагаем выполненными условия (1.14), а интегрирование по  $\cos \theta$  считаем эффективно обрезанным в интервале

$$|\delta\theta|^2 \ll |p - p_F| / |p_F| \quad \text{или} \quad |\delta\theta|^2 \ll 2\pi T / \varepsilon_F \quad (1.27)$$

вблизи  $\theta \sim \pi$ , что выделяет узкий конус, соответствующий доминирующей роли рассеяния назад. При  $|p - p_F| \sim 0,05 p_F$  имеем  $|\delta\theta| \ll 0,22$ . Поэтому в трехмерном варианте нашей модели реальное взаимодействие  $|\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 S(\mathbf{q})$  заменяется модельным

$$\frac{4\pi^2}{K^2 \Omega_0} A^2 \delta(q - K) \delta(\cos \theta + 1).$$

Оставшееся возмущение

$$\tilde{A}^2(q, \theta) = |\langle \mathbf{p}+\mathbf{q} | V | \mathbf{p} \rangle|^2 S(\mathbf{q}) - \frac{4\pi^2}{K^2 \Omega_0} A^2 \delta(q - K) \delta(\cos \theta + 1)$$

приводит к появлению упоминавшихся выше слабых перенормировок плотности состояний. Нетрудно видеть, что в трехмерном случае вместо (1.15) имеет место

$$\xi_{|\mathbf{p}+\mathbf{q}|} = -\xi_{|\mathbf{p}|} \quad \text{при} \quad |\mathbf{p}| \sim K/2. \quad (1.28)$$

Дальнейшее рассмотрение совпадает с (1.17) — (1.23), все формулы остаются в силе и для трехмерной системы.

### 2. Вершинная часть, поляризационный оператор и диэлектрическая функция

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 слабого внешнего поля [6]:

$$\frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} = G(\epsilon p) J^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) G(\epsilon + \omega p + q), \quad (2.1)$$

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

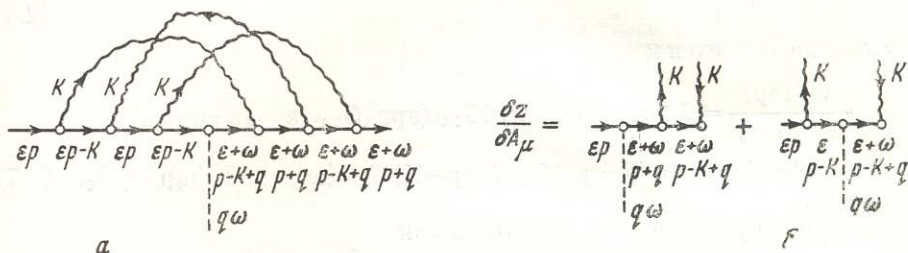


Рис. 6

искомая вершинная часть. При этом для свободной функции Грина имеем

$$\frac{\delta G_0(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} = G_0(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) G_0(\epsilon + \omega p + q), \quad (2.2)$$

где свободная вершина

$$J_0^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) = \begin{cases} -e p / m c, & \mu = 1, 2, 3 \\ e, & \mu = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

В рассматриваемой модели вариационная производная (2.1) может быть вычислена непосредственно. В самом деле, из (1.17) — (1.19) имеем

$$\begin{aligned} \frac{\delta G(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} &= \frac{\delta}{\delta A_\mu(q\omega)} \left\langle \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} [\xi z(\epsilon p)]^n \right\rangle_\zeta G_0(\epsilon p) \right\rangle = \\ &= \left\langle \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} [\xi z(\epsilon p)]^{m-1} \zeta \frac{\delta z(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} [\xi z(\epsilon + \omega p + q)]^{n-m} \cdot \right. \\ &\quad \left. \cdot G_0(\epsilon + \omega p + q) + \sum_{n=0}^{\infty} [\xi z(\epsilon p)]^n \frac{\delta G_0(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} \right\rangle_\zeta, \end{aligned} \quad (2.4)$$

так как  $\delta G(\epsilon p) / \delta A_\mu(q\omega)$  получается из множества диаграмм типа рис. 3 путем вставки линии внешнего поля в любую из электронных линий рис. 3 (см. рис. 6, а). В (2.4)  $m$  — номер того блока  $z(\epsilon p)$  рис. 6, а, в который входит линия внешнего поля. Используя (2.2), нетрудно убедиться, что (см. рис. 6, б)

$$\begin{aligned} \frac{\delta z(\epsilon p)}{\delta A_\mu(q\omega)} &= G_0(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p \epsilon + \omega p + q) z(\epsilon + \omega p + q) + \\ &+ z(\epsilon p) J_0^\mu(\epsilon p - K \epsilon + \omega p - K + q) G_0(\epsilon + \omega p - K + q). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Подставляя (2.2) и (2.5) в (2.4), после некоторых преобразований получим

$$\frac{\delta G(\varepsilon \mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = J_0^\mu(\varepsilon \mathbf{p}\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) G_0(\varepsilon \mathbf{p}) G_0(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) \cdot \left\langle \sum_{n=0}^{\infty} \xi^n z^n(\varepsilon \mathbf{p}) \sum_{m=0}^{\infty} \xi^m z^m(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\rangle_\zeta + J_0^\mu(\varepsilon \mathbf{p} - \mathbf{K}\varepsilon + \omega \mathbf{p} - \mathbf{K} + \mathbf{q}) \left\langle \frac{1}{\zeta A^2} \sum_{n=1}^{\infty} \xi^n z^n(\varepsilon \mathbf{p}) \sum_{m=1}^{\infty} \xi^m z^m(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) \right\rangle_\zeta, \quad (2.6)$$

что сразу же сводится к

$$\frac{\delta G(\varepsilon \mathbf{p})}{\delta A_\mu(\mathbf{q}\omega)} = J_0^\mu(\varepsilon \mathbf{p}\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}) \langle G_{\zeta A^2}(\varepsilon \mathbf{p}\mathbf{p}) G_{\zeta A^2}(\varepsilon + \omega \mathbf{p} + \mathbf{q}\mathbf{p} + \mathbf{q}) \rangle_\zeta + J_0^\mu(\varepsilon \mathbf{p} - \mathbf{K}\varepsilon + \omega \mathbf{p} - \mathbf{K} + \mathbf{q}) \langle G_{\zeta A^2}(\varepsilon \mathbf{p}\mathbf{p} - \mathbf{K}) G_{\zeta A^2}(\varepsilon + \omega \mathbf{p} - \mathbf{K} + \mathbf{q}\mathbf{p} + \mathbf{q}) \rangle_\zeta, \quad (2.7)$$

где  $G_{A^2}(\varepsilon \mathbf{p}\mathbf{p})$  определена в (1.20), тогда как

$$G_{A^2}(i\varepsilon_n \mathbf{p}\mathbf{p} - \mathbf{K}) = + \frac{A}{(i\varepsilon_n)^2 - \xi_p^2 - A^2} \quad (2.8)$$

представляет собой аномальную функцию Грина идеального полупроводника, описывающую элементарный процесс переброса  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \mathbf{K}$ .

Мы видим, что в рассматриваемой модели электромагнитная реакция описывается теми же формулами, что и в идеальном полупроводнике типа экситонного изолятора, но с флуктуирующей энергетической щелью. При этом возникают конечные выражения, связанные с парными произведениями аномальных функций Грина, тогда как среднее типа (1.19) от (2.8) отсутствует, 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.

Перейдем к рассмотрению диэлектрических свойств нашей системы. Поскольку поляризационный оператор непосредственно связан со скалярной вершиной, из (2.7) имеем

$$\Pi(\mathbf{q}\omega_m) = -2 \int_0^\infty d\xi e^{-\xi T} \sum_n \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \{ G_{\zeta A^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}\mathbf{p}) G_{\zeta A^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}\mathbf{p} + \mathbf{q}) + G_{\zeta A^2}(\varepsilon_n \mathbf{p}\mathbf{p} - \mathbf{K}) G_{\zeta A^2}(\varepsilon_n + \omega_m \mathbf{p} + \mathbf{q}\mathbf{p} - \mathbf{K} + \mathbf{q}) \} \equiv \langle \Pi_{\zeta A^2}(\mathbf{q}\omega_m) \rangle_\zeta. \quad (2.9)$$

Проводя стандартным образом суммирование по мацубаровским частотам и выполняя аналитическое продолжение  $i\omega_m \rightarrow \omega + i\delta$ , получаем [14]

$$\Pi_{A^2}(\mathbf{q}\omega) = - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + \xi_p \xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + A^2}{E_p E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}} \{ f(E_p) - f(E_{\mathbf{p}+\mathbf{q}}) \}.$$



$$\left\{ \frac{1}{E_p - E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p - E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} + \frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{p+q} - \xi_p \xi_{p+q} - A^2}{E_p E_{p+q}} \cdot \{1 - f(E_p) - f(E_{p+q})\} \left\{ \frac{1}{E_p + E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p + E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\} \quad (2.10)$$

— поляризационный оператор идеального полупроводника. Здесь  $E_p = (\xi_p^2 + A^2)^{1/2}$ ;  $f(E_p) = \{\exp(E_p/T) + 1\}^{-1}$  — фермиевская функция распределения.

При  $A^2 \rightarrow 0$  второе слагаемое в (2.10) стремится к нулю, тогда как первое дает обычный поляризационный оператор электронного газа. С другой стороны, при  $T \rightarrow 0$ , но  $A^2 \neq 0$  первый член в (2.10) обращается в нуль, так что

$$\Pi_{A^2}(\mathbf{q}\omega) = \frac{1}{2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{E_p E_{p+q} - \xi_p \xi_{p+q} - A^2}{E_p E_{p+q}} \cdot \left\{ \frac{1}{E_p + E_{p+q} + \omega + i\delta} + \frac{1}{E_p + E_{p+q} - \omega - i\delta} \right\}. \quad (2.11)$$

Диэлектрическая функция есть

$$\varepsilon(\mathbf{q}\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi(\mathbf{q}\omega) = \langle \varepsilon_{\zeta A^2}(\mathbf{q}\omega) \rangle_{\zeta}, \quad (2.12)$$

где

$$\varepsilon_{A^2}(\mathbf{q}\omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \Pi_{A^2}(\mathbf{q}\omega) \quad (2.13)$$

— диэлектрическая функция идеального полупроводника.

Рассмотрим сначала случай  $\omega = 0$ . При  $v_F q \ll |A|$  из (2.11) получим

$$\Pi_{A^2}(\mathbf{q}0) = \frac{v_F^2 q^2}{18} \frac{m p_F}{\pi^2 A^2} = \frac{q^2}{4\pi e^2} \frac{v_F^2 \kappa^2}{18 A^2}, \quad (2.14)$$

так что

$$\varepsilon_{A^2}(\mathbf{q}0) = 1 + v_F^2 \kappa^2 / 18 A^2 = 1 + \omega_p^2 / 6 A^2, \quad (2.15)$$

где  $\kappa^2 = 4m p_F e^2 / \pi$  — квадрат обратного радиуса дебаевской экранировки;  $\omega_p^2 = 4\pi n e^2 / m$  — квадрат плазменной частоты ( $n$  — полная плотность электронов).

С другой стороны, при  $v_F q \gg |A|$  из (2.10) — (2.11) следует

$$\Pi_{A^2}(\mathbf{q}0) = m p_F / \pi^2 = \kappa^2 / 4\pi e^2, \quad (2.16)$$

так что

$$\varepsilon_{A^2}(\mathbf{q}0) = 1 + \kappa^2 / q^2, \quad (2.17)$$

т. е. обычное дебаевское экранирование.

Мы используем простейшую интерполяцию от (2.15) к (2.17):

$$\varepsilon_{A^2}(\mathbf{q}0) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2 + 18 A^2 / v_F^2}. \quad (2.18)$$

Тогда для рассматриваемой модели неупорядоченной системы получаем

$$\varepsilon(\mathbf{q}0) = \int_0^\infty d\zeta e^{-\zeta} \varepsilon_{\zeta A^2}(\mathbf{q}0) = 1 - \frac{v_F^2 \kappa^2}{18 A^2} \exp\left(\frac{v_F^2 q^2}{18 A^2}\right) \text{Ei}\left(-\frac{v_F^2 q^2}{18 A^2}\right), \quad (2.19)$$

где  $\text{Ei}(-x)$  — интегральная показательная функция. При  $v_F q \gg |A|$  ис-

пользуем асимптотику

$$\text{Ei}(-x) \approx -e^{-x}/x \quad (x \rightarrow \infty)$$

и получим (2.17). При  $v_F q \ll |A|$  используем

$$\text{Ei}(-x) \sim \ln x, \quad (x \rightarrow 0)$$

так что

$$\varepsilon(q_0) \approx 1 - \frac{v_F^2 \kappa^2}{18A^2} \ln \frac{v_F^2 q^2}{18A^2}. \quad (2.20)$$

Соответственно эффективное кулоновское взаимодействие принимает вид

$$\Gamma(q_0) \approx 4\pi \tilde{e}^2 / q^2, \quad (2.21)$$

$$\tilde{e}^2 = e^2 / \left( 1 - \frac{v_F^2 \kappa^2}{18A^2} \ln \frac{v_F^2 q^2}{18A^2} \right), \quad (2.22)$$

что формально напоминает известную ситуацию «нуля — заряда» в теории поля. Поведение типа (2.20) — (2.22) было недавно получено при рассмотрении так называемых бесщелевых полупроводников [15].

Перейдем к рассмотрению случая  $\omega \neq 0$ ,  $v_F q \ll |A|$ . Из (2.11) имеем

$$\text{Re } \Pi_{A^2}(q\omega) = \frac{v_F^2 q^2}{12} \frac{m p_F}{2\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \frac{A^2}{(\xi_p^2 + A^2)^{3/2}} \frac{1}{\xi_p^2 + A^2 - \omega^2/4}, \quad (2.23)$$

$$\text{Im } \Pi_{A^2}(q\omega) = \frac{v_F^2 q^2}{12} \frac{m p_F}{2\pi^2} \frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \frac{A^2}{(\xi_p^2 + A^2)^2} \cdot \left\{ \delta \left[ \frac{\omega}{2} - (\xi_p^2 + A^2)^{1/2} \right] - \delta \left[ \frac{\omega}{2} + (\xi_p^2 + A^2)^{1/2} \right] \right\}. \quad (2.24)$$

Рассмотрим сначала действительную часть диэлектрической функции. Из (2.23) получаем

$$\text{Re } \varepsilon_{A^2}(\omega) = 1 + \frac{\pi}{2} \frac{n e^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_p \frac{A^2}{(\xi_p^2 + A^2)^{3/2}} \frac{1}{\xi_p^2 + A^2 - \omega^2/4}. \quad (2.25)$$

При  $\omega \rightarrow 0$  ( $\omega \ll 2|A|$ ) отсюда естественно следует (2.15). При  $\omega \gg 2|A|$  получаем плазменный предел:

$$\text{Re } \varepsilon_{A^2}(\omega) \approx 1 - \omega_p^2 / \omega^2. \quad (2.26)$$

Используем простейшую аппроксимацию:

$$\text{Re } \varepsilon_{A^2}(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{6A^2} \theta \left( 1 - \frac{\omega^2}{4A^2} \right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \theta \left( \frac{\omega^2}{4A^2} - 1 \right). \quad (2.27)$$

Тогда из (2.12)

$$\text{Re } \varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{6A^2} \text{Ei} \left( -\frac{\omega^2}{4A^2} \right) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \{ 1 - e^{-\omega^2/4A^2} \}. \quad (2.28)$$

При  $\omega \gg 2|A|$  отсюда следует плазменный предел (2.26). При  $\omega \ll 2|A|$  получаем аналогично (2.21)

$$\text{Re } \varepsilon(\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6A^2} \ln \frac{\omega^2}{4A^2}. \quad (2.29)$$

Подчеркнем, что качественное поведение  $\text{Re } \varepsilon(\omega)$  оказывается практически не зависящим от способа интерполяции в формулах типа (2.19), (2.27). Можно объединить (2.20) и (2.29), записав единое выражение, справедливое с логарифмической точностью:

$$\text{Re } \varepsilon(q\omega) \approx 1 - \frac{\omega_p^2}{6A^2} \ln \frac{\max\{\omega^2; v_F^2 q^2\}}{4A^2}. \quad (2.30)$$

Этот результат справедлив лишь при  $\omega \ll 2|A|$ ,  $v_F q \ll |A|$ . Интерполяционная формула (2.28) описывает весь интервал частот. Легко убедиться, что  $\text{Re } \varepsilon(\omega)$ , определяемая (2.28), не имеет других нулей, кроме плазменного, который возникает в пределе  $\omega \gg 2|A|$ .

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

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \omega \text{Im } \varepsilon(\omega) / 4\pi. \quad (2.31)$$

Из (2.11) и (2.12) получаем

$$\begin{aligned} \text{Im } \varepsilon(\omega) &= \frac{\pi}{4} \frac{ne^2}{m} \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \int_{-\infty}^\infty d\xi_p \frac{\xi A^2}{(\xi_p^2 + \xi A^2)^2} \cdot \\ &\cdot \left\{ \delta \left[ \frac{\omega}{2} - (\xi_p^2 + \xi A^2)^{1/2} \right] - \delta \left[ \frac{\omega}{2} + (\xi_p^2 + \xi A^2)^{1/2} \right] \right\} = \\ &= 2\pi^2 \frac{ne^2}{m} \frac{|A|}{\omega^3} \int_0^{\omega^2/4A^2} d\xi e^{-\xi} \frac{\xi}{(\omega^2/4A^2 - \xi)^{1/2}} = \\ &= \pi \left( \frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \frac{|A|}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\omega^2}{4A^2} \right\} \left\{ \frac{\omega^2}{4A^2} - \frac{d}{d\alpha} \right\} \text{Erfi } \alpha^{1/2} \frac{\omega}{2|A|} \Big|_{\alpha=1}. \quad (2.32) \end{aligned}$$

Соответственно

$$\text{Re } \sigma(\omega) = \pi \frac{ne^2}{m\omega} \frac{|A|}{\omega} \exp \left\{ -\frac{\omega^2}{4A^2} \right\} \left\{ \frac{\omega^2}{4A^2} - \frac{d}{d\alpha} \right\} \text{Erfi } \alpha^{1/2} \frac{\omega}{2|A|} \Big|_{\alpha=1}. \quad (2.33)$$

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

$$\text{Im } \varepsilon(\omega) \approx \pi \left( \frac{\omega_p}{\omega} \right)^2 \left( \frac{A}{\omega} \right)^2, \quad (2.34)$$

$$\text{Re } \sigma(\omega) \approx \frac{ne^2}{m\omega} \pi \left( \frac{A}{\omega} \right)^2. \quad (2.35)$$

При  $\omega \ll 2|A|$

$$\text{Im } \varepsilon(\omega) \approx \pi \omega_p^2 / 6A^2, \quad (2.36)$$

$$\text{Re } \sigma(\omega) \approx \frac{ne^2}{m} \pi \frac{\omega}{6A^2} \rightarrow 0 \quad \text{при } \omega \rightarrow 0. \quad (2.37)$$

Статическая проводимость в нашем приближении обращается в нуль, что означает своего рода брэгговскую локализацию электронов. Аналогичным образом равна нулю статическая проводимость идеального полупроводника при  $T=0$ . Мы получили аналог обычного межзонного поглощения. Вместе с тем (2.36) показывает, что наша модель описывает вещество, промежуточное между металлом и диэлектриком: в металле  $\text{Im } \varepsilon(\omega) \infty$

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

Следует отметить, что наши формулы, вообще говоря, несправедливы в области малых частот, ввиду того что все рассмотрение несправедливо вблизи центра псевдощели в смысле первого из условий (1.14), когда  $\epsilon \sim \xi_p \sim 0$ . Поэтому проведенное вычисление поляризационного оператора справедливо, очевидно, лишь в области достаточно высоких частот:

$$\omega \gg v_F \gamma = v_F / R_c, \quad (2.38)$$

где  $\gamma$  и  $R_c$  определены в (1.14). При  $R_c \gg 20 a$  речь идет о частотах больше или порядка  $1/4 \div 1/8$  от ширины псевдощели. Условие (2.38) имеет ясный смысл — за характерное время изменения внешнего поля электрон перемещается на расстояние меньше  $R_c$ . Естественно, что учет конечной температуры также изменит асимптотическое поведение  $\epsilon(q\omega)$  при малых  $q$  и  $\omega$  за счет появления возбужденных носителей в «верхней зоне».

В заключение отметим, что рассмотренная модель и все полученные выше результаты могут быть использованы при анализе свойств одномерных систем, претерпевающих пайерлсовский структурный переход (типа TTF — TCNQ), так как сильные флуктуации параметра порядка в одномерном случае в определенном смысле делают такие системы похожими на «жидкие полупроводники» [16]. Поскольку  $R_c$  при этом может достигать сотен межатомных расстояний, а температуры достаточно низки, область применимости теории существенно расширяется.

Автор выражает глубокую благодарность Л. В. Келдышу, Е. Г. Максимуму и Д. И. Хомскому за многочисленные обсуждения и ценные указания.

Физический институт им. П. Н. Лебедева  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
1 ноября 1973 г.

### Литература

- [1] N. F. Mott, E. A. Davis. *Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*. Oxford 1971. Н. Мотт. Электроны в неупорядоченных структурах, «Мир», 1969.
- [2] R. S. Allgaier. *Phys. Rev.*, **185**, 227, 1969; *Phys. Rev.*, **B2**, 2257, 1970.
- [3] А. Р. Регель, А. А. Андреев, Б. И. Казанджан, А. А. Лобанов, М. Мамадалиев, И. А. Смирнов, Е. В. Шадринцев. *Proc. 10<sup>th</sup> Intern. Conf. on the Physics of Semiconductors*. Cambridge, Massachusetts, 1970.
- [4] В. А. Алексеев, А. А. Андреев, В. Я. Прохоренко. *УФН*, **106**, 393, 1972.
- [5] У. Харрисон. *Псевдопотенциалы в теории металлов*, «Мир», 1968.
- [6] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, 1963.
- [7] Д. Пайнс, Ф. Нозьер. *Теория квантовых жидкостей*, «Мир», 1967.
- [8] S. F. Edwards. *Phil. Mag.*, **6**, 617, 1961; *Proc. Roy. Soc.*, **A267**, 518, 1962.
- [9] М. В. Садовский. *Препринт ФИАН № 63*, 1973.
- [10] Н. Н. Боголюбов. *Квазисредние в задачах статистической механики*. Препринт Р-1451, Дубна, 1963. *Избр. труды*, **3**, «Наукова думка», 1971.
- [11] L. Ballentine. *Canadian J. Phys.*, **44**, 2533, 1966.
- [12] R. Shaw, N. Smith. *Phys. Rev.*, **178**, 985, 1969.
- [13] J. Ziman. *J. of Phys.*, **C2**, 1704, 1969.
- [14] А. Н. Козлов, Л. А. Максимов. *ЖЭТФ*, **48**, 1184, 1965.
- [15] А. А. Абрикосов, С. Д. Бенеславский. *ЖЭТФ*, **59**, 1280, 1970.
- [16] P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 462, 1973.