

## ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ В ОДНОЙ МОДЕЛИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ

*М. В. Садовский*

Рассматривается одномерная система электронов, находящихся в гауссовом случайном поле с коррелятором, имеющим (в импульсном пространстве) вид лоренциана с центром при  $Q=2p_F$ . Такая модель может рассматриваться как гауссова модель пайерлсовского перехода во флуктуационной области. Проведено точное суммирование всех фейнмановских диаграмм и получено представление усредненной одноэлектронной функции Грина в виде некоторой цепной дроби. Найдена плотность состояний с характерной псевдощелью. Показано, как при уменьшении радиуса корреляций ближнего порядка происходит постепенное заполнение псевдощели и переход в «металлическое» состояние.

### Введение

Существует ограниченное число моделей электронной структуры одномерных неупорядоченных систем, допускающих точное решение [1]. Интерес к таким моделям связан как с общей проблемой изучения электронных свойств неупорядоченных систем, так и с запросами физики квазиодномерных систем, в большинстве которых проявляются те или иные свойства, связанные с их неупорядоченностью. В последние годы был получен ряд важных новых результатов, во многом прояснивших ситуацию с электроном в одномерном случайном поле [2-4]. Вместе с тем для большинства этих работ характерно использование специфических методов решения, специально приспособленных для решения именно одномерных задач и, как правило, не допускающих дальнейшего обобщения ввиду их громоздкости. Лишь в очень немногих случаях удается получить точное решение задачи об электроне в одномерном случайном поле с помощью стандартных методов современной теории систем многих частиц [5].

Одна из моделей такого рода была предложена некоторое время назад автором (см. [6]). В рамках этой модели удалось показать, как рассеяние электрона случайным полем с определенным типом ближнего порядка приводит к образованию своего рода «зонной структуры» энергетического спектра, проявляющейся в виде характерной псевдощели в плотности электронных состояний, при отсутствии какого-либо дальнего порядка. При этом удалось также рассмотреть высокочастотную проводимость и оптическое поглощение через псевдощель. Эта модель была использована для описания флуктуационной области квазиодномерных систем, испытывающих пайерлсовский переход [7], причем оказалось, что предсказания этой модели находятся в хорошем количественном согласии с оптическими экспериментами на КСР и TTF-TCNQ [8], по крайней мере в области достаточно высоких температур.

Некоторый вариант этой же модели был рассмотрен в [9], как обобщение [7] для флуктуационной области соизмеримого пайерлсовского перехода. Точное решение [6,7] было получено в пределе большого радиуса корреляций ближнего порядка, при этом были указаны качественные кри-



теории применимости такого рассмотрения для конечного радиуса корреляций. В настоящей работе получено точное решение для одноэлектронной функции Грина в виде некторой цепной дроби и для электронной плотности состояний при любых значениях радиуса корреляций ближнего порядка, что позволяет проследить плавный переход к «металлическому» состоянию (заполнение псевдощели) по мере уменьшения радиуса корреляций и оправдать полученные ранее [7] качественные критерии применимости асимптотики больших радиусов корреляции.

### 1. Формулировка модели и анализ фейнмановских диаграмм

Мы рассмотрели электрон в гауссовском случайном поле  $\Delta(x)$  с корреляционной функцией:

$$\langle \Delta(x)\Delta(x') \rangle = \Delta^2 \exp[-|x-x'|/\xi^{-1}] \cos 2p_F(x-x'), \quad (1)$$

где  $\Delta^2$  определяет средний квадрат флуктуаций этого поля,  $\xi$  — корреляционная длина (радиус корреляций ближнего порядка),  $p_F$  — импульс Ферми электронов. Именно такой коррелятор получается для флуктуаций параметра порядка в одномерной модели Гинзбурга — Ландау для пайерлсовского перехода [10], поэтому в дальнейшем мы для конкретности будем говорить о пайерлсовской системе во флуктуационной области.

Следует заметить, что наше предположение о гауссовости случайного поля  $\Delta(x)$ , по-видимому, неприменимо для реальных пайерлсовских систем, по крайней мере для достаточно низких температур  $T \ll T_{p0}$ , где  $T_{p0}$  — температура пайерлсовского перехода в приближении самосогласованного поля [11]. Мы рассматриваем гауссову модель пайерлсовского перехода (с точным коррелятором (1)), поскольку она допускает точное решение, полученное ниже, а также потому, что она, по-видимому, не столь далека от реальности в области  $T \sim T_{p0}$ .

Корреляционная длина  $\xi$  будет считаться параметром теории, так же как и величина  $\Delta^2$ . Их нахождение требует полной микроскопической теории пайерлсовского перехода. Рассматриваемая модель может быть также получена в некотором варианте статического приближения динамической теории пайерлсовского перехода [6, 9] (предположение о существовании ярко выраженного центрального пика в динамическом структурном факторе решетки, испытывающей пайерлсовский переход). Модель может также иметь отношение к свойствам жидких полупроводников [6].

Фурье-образ (1) (статический структурный фактор) имеет вид

$$S(Q) = 2\Delta^2 \left\{ \frac{\kappa}{(Q-2p_F)^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{(Q+2p_F)^2 + \kappa^2} \right\}, \quad (2)$$

где  $\kappa = \xi^{-1}$ . Простейшая собственно энергетическая часть одноэлектронной функции Грина имеет вид ( $p$  — импульс электрона)

$$\Sigma(\epsilon_n p) = \Delta^2 \int \frac{dQ}{2\pi} S(Q) \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_{p+Q}}, \quad (3)$$

графически представленный на рис. 1, а, где волнистая линия соответствует формуле (2), а сплошная линия — свободной функции Грина электрона. Здесь  $\xi_p$  — энергия свободных электронов, отсчитанная от уровня Ферми,  $\epsilon_n = (2n+1)\pi T$ .

Наиболее подробно мы рассмотрим случай почти свободных электронов:

$$\xi_p = p^2/2m - \mu \approx v_F(|p| - p_F), \quad (4)$$



где  $m$  — масса электрона,  $v_F$  — скорость Ферми,  $\mu$  — химический потенциал. При этом  $2p_F$ , вообще говоря, считается несоизмеримым с периодом исходной решетки.

Кроме этого, мы рассмотрим выделенный [9] случай спектра в приближении сильной связи

$$\xi_p = -W \cos pa, \tag{5}$$

где  $a$  — период исходной решетки, полагая  $2p_F = \pi/a$ , что соответствует наполовину заполненной зоне и переходу с удвоением периода, т. е. случаю предельной соизмеримости, когда пайерлсовский параметр порядка становится действительным.

Из (2) и (3) получаем (далее для конкретности считаем начальный импульс электрона  $p \infty + p_F$ )

$$\begin{aligned} \Sigma(\varepsilon_n p) &= \Delta^2 \{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa\}^{-1} \equiv \\ &\equiv \Delta^2 G_0(\varepsilon_n, -\xi_p - iv_F \kappa), \end{aligned} \tag{6}$$

где учтено, что для одномерной системы  $\xi_{p-2p_F} = -\xi_p$ . Выражение (6), соответствующее простейшей диаграмме рис. 1, а, было положено в основу анализа, проведенного в работе Ли, Райса и Андерсона [10]. В [6, 7] были просуммирова-

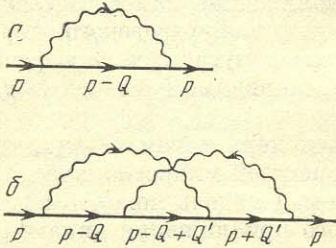


Рис. 1

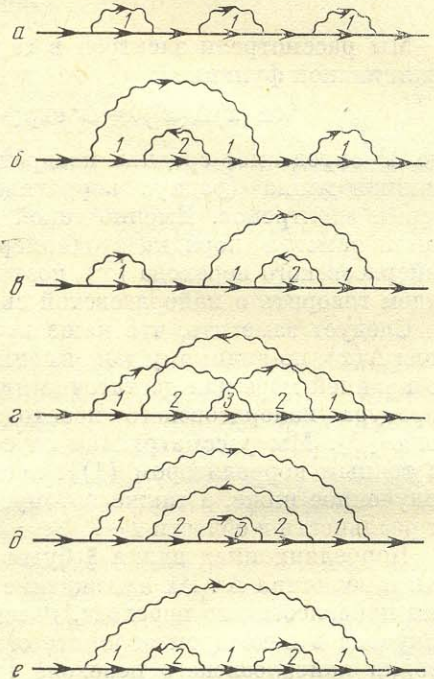


Рис. 2

ны все диаграммы гауссовской модели пайерлсовского перехода в асимптотике  $\kappa \rightarrow 0$ , что, как видно из (6), справедливо при выполнении неравенства

$$v_F \kappa = v_F \xi^{-1} \ll \xi_p; 2\pi T. \tag{7}$$

Этим накладывается ограничение на описание непосредственной окрестности уровня Ферми. Наша задача состоит теперь в суммировании всех графиков гауссовой модели с учетом конечности  $\kappa$ .

Как было показано ранее [7], в каждом порядке теории возмущений вклад одного порядка дают диаграммы с чередующейся последовательностью вершин с входящими или выходящими линиями взаимодействия, передающими импульс  $Q \sim \pm 2p_F$ . Диаграммы типа рис. 1, б малы по параметру  $\xi_p/\varepsilon_F$  ( $\varepsilon_F$  — энергия Ферми) [12] и могут быть отброшены. Поэтому в порядке  $2n$  ( $2n$  — число вершин) нужно учесть всего  $n!$  диаграмм.

На рис. 2 изображены все существенные диаграммы шестого порядка. Рассмотрим вклад диаграммы рис. 2, г. После элементарных вычислений получаем, что рисунку 2, г соответствует



$$\Delta^6 \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F\kappa} \cdot$$

$$\frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F\kappa} \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}$$

Для остальных диаграмм рис. 2 вклады совершенно аналогичны, цифры над электронными линиями на рис. 2 означают, сколько раз  $iv_F\kappa$  входит в соответствующий знаменатель. Заметим, что вклад «перекрестной» диаграммы рис. 2, *г* равен вкладу диаграммы без пересечений линий взаимодействия рис. 2, *д*. Подчеркнем, что простота выражений для вкладов различных диаграмм обусловлена выбором структурного фактора  $S(Q)$  в виде лоренциана (2).

В восьмом порядке имеется всего  $4! = 24$  существенные диаграммы, на рис. 3 показаны все неприводимые диаграммы. Соответствующие вклады легко находятся и имеют аналогичный вид, соответственно цифрам, расставленным над электронными линиями на рис. 3. При этом вклады целого ряда диаграмм снова равны друг другу:  $a = b = v = g$ ;  $d = e = ж = z$ ;  $u = \kappa$ ;  $л = м$ .

Теперь ясна общая закономерность выписывания выражений, соответствующих любой диаграмме. Вклад любой диаграммы определяется расстановкой начальных и конечных вершин (на рис. 3 они отмечены буквами  $n$  и  $\kappa$ ). В каждой электронной линии, следующей за вершиной  $n$ -типа, добавляется слагаемое  $iv_F\kappa$  в знаменателе, а в электронной линии, следующей за вершиной  $\kappa$ -типа, такое слагаемое вычитается. При этом ход (направление) линий взаимодействия не важен.

Найденные закономерности сохраняются и при рассмотрении задачи со спектром в приближении сильной связи (5) для наполовину заполненной зоны. При этом, однако, следует учитывать и диаграммы типа рис. 1, *б*, на которых линии взаимодействия не обязательно чередуются по направлению движения импульса передачи, так как при спектре (5) точки  $p$ ,  $p + 2p_F$  и  $p - 2p_F$  эквивалентны (при  $2p_F = \pi/a$ ) [9], т. е. все возможные диаграммы. Тогда в порядке  $2n$  возникает всего  $(2n-1)!! = (2n-1)!/2^{n-1}(n-1)!$  диаграмм, причем каждая линия взаимодействия имеет при этом два направления, так что вклад каждой линии взаимодействия умножается на 2 [9]. Правила появления слагаемых  $iv_F\kappa$  в знаменателях функций Грина остаются теми же, что и выше.

Далее мы следуем методу, предложенному (для другой задачи) в работе Елютина [13]. Из предыдущего легко видеть, что вклад любой диаграммы определяется расстановкой начальных и конечных вершин. При этом любую диаграмму с пересечением линий взаимодействия можно однозначно представить диаграммой без пересечений, так как любая диаграмма с пересечениями равна некоторой диаграмме без пересечений. Рецепт построения соответствующей диаграммы без пересечений (для заданной расстановки  $n$  и  $\kappa$  вершин) таков: нужно первую, считая слева, конечную вершину соединить линией взаимодействия с ближайшей к ней слева начальной вершиной и т. д. для оставшихся еще не соединенными вершин. Таким образом, например, диаграммы рис. 3, *б*, *в*, *г* приводятся к виду рис. 3, *а*, диаграммы рис. 3, *д*, *е* приводятся к виду рис. 3, *ж* и т. д. Для фиксированной расстановки начальных вершин в задаче с электронным спектром (4) конечные вершины могут выбираться только из точек противоположной четности, а для задачи со спектром (5) конечные вершины могут выбираться и из точек той же четности, что и начальные. Числа, сопоставляемые электронным линиям на рис. 2, 3, можно перенести на вершины, сопоставив вершине число слагаемых  $iv_F\kappa$  в электронном



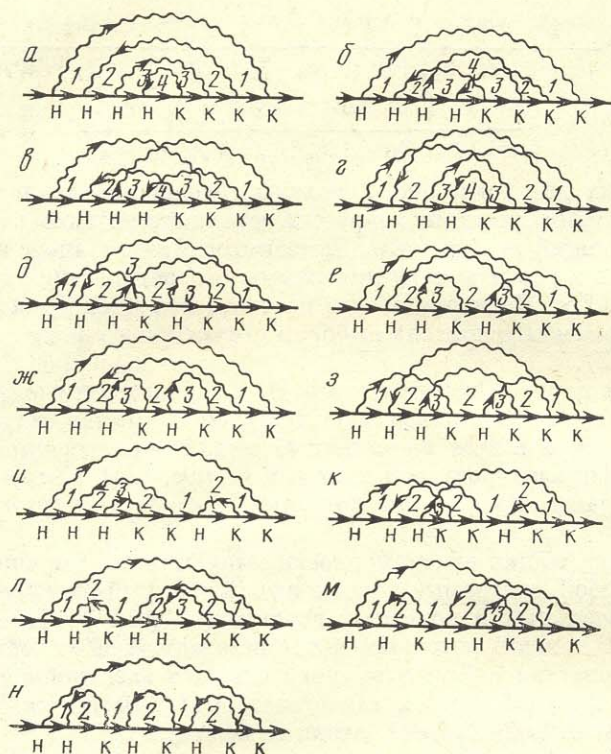


Рис. 3

знаменателе, соответствующем линии, идущей после этой вершины. Общее правило таково [13]: начальной вершине сопоставляется число  $N_n = N_{n-1} + 1$ , где  $N_{n-1}$  — число, сопоставляемое ближайшей вершине слева. Конечной вершине сопоставляется число  $N_n = N_{n-1} - 1$ . При этом  $N_0 = 0$ , а  $n$  — суть порядковый номер вершины.

Введем

$$v(k) = \begin{cases} (k+1)/2 & \text{при } k=2m+1 \\ k/2 & \text{при } k=2m \end{cases} \quad (8)$$

для задачи со спектром (4), и

$$v(k) = k \quad (9)$$

для задачи со спектром (5). Тогда можно убедиться, что число неприводимых собственно энергетических диаграмм, равных заданной диаграмме без пересечений линий взаимодействия с фиксированной расстановкой начальных вершин, равно произведению  $v(N_n)$  для всех начальных вершин этой диаграммы [13]. Таким образом, можно все дальнейшие рассуждения вести в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия, сопоставляя при этом всем  $n$  вершинам соответствующие множители  $v(N_n)$ .

## 2. Одноэлектронная функция Грина

Любая диаграмма для неприводимой собственно энергетической части, перестроенная согласно сформулированным выше правилам, содержит охватывающую линию взаимодействия, т. е. приводится к виду, представ-

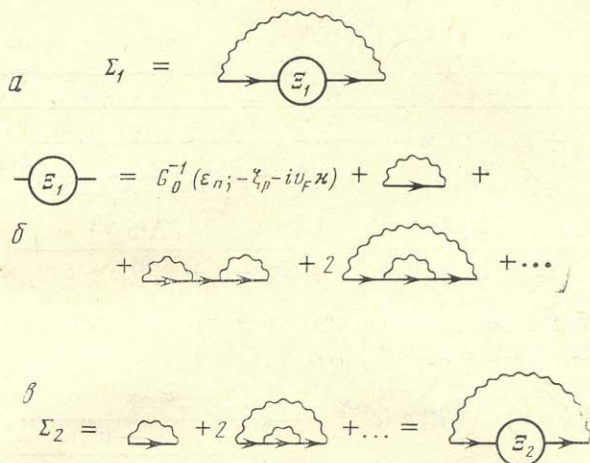


Рис. 4

ленному на рис. 4, а. Это позволяет легко получить рекуррентные формулы для определения собственно энергетической части, лежащие в основе метода Елютина [13]. Имеем, по определению собственно энергетической части, уравнение Дайсона для функции Грина:

$$G^{-1}(\varepsilon_n \xi_p) = G_0^{-1}(\varepsilon_n \xi_p) - \Sigma_1(\varepsilon_n \xi_p), \quad (10)$$

где (см. рис. 4, а)

$$\Sigma_1(\varepsilon_n \xi_p) = \frac{\Delta^2}{(i\varepsilon_n + \xi_p + i\nu_F\kappa)^2} \Xi_1(\varepsilon_n \xi_p) = \Delta^2 G_0^{-2}(\varepsilon_n, -\xi_p - i\nu_F\kappa) \Xi_1(\varepsilon_n \xi_p), \quad (11)$$

причем для  $\Xi_1(\varepsilon_n \xi_p)$  имеем разложение рис. 4, б в терминах диаграмм без пересечений линий взаимодействия с дополнительными множителями  $v(N_n)$ , сопоставляемыми н вершинам. Это разложение стандартным путем выражается через соответствующие неприводимые графики:

$$\Xi_1(\varepsilon_n \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, -\xi_p - i\nu_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, -\xi_p - i\nu_F\kappa) - \Sigma_2(\varepsilon_n \xi_p)\}, \quad (12)$$

где  $\Sigma_2(\varepsilon_n \xi_p)$  выражается суммой неприводимых графиков рис. 4, в:

$$\Sigma_2(\varepsilon_n \xi_p) = \Delta^2 G_0^2(\varepsilon_n, \xi_p - 2i\nu_F\kappa) \Xi_2(\varepsilon_n \xi_p), \quad (13)$$

$$\Xi_2(\varepsilon_n \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, \xi_p - 2i\nu_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, \xi_p - 2i\nu_F\kappa) - \Sigma_3(\varepsilon_n \xi_p)\} \quad (14)$$

и т. д. В итоге имеем:

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_p) = \Delta^2 G_0^2(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ik\nu_F\kappa) v(k) \Xi_k(\varepsilon_n \xi_p), \quad (15)$$

$$\Xi_k(\varepsilon_n \xi_p) = G_0^{-2}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ik\nu_F\kappa) \{G_0^{-1}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ik\nu_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_p)\}, \quad (16)$$

$$\Sigma_k(\varepsilon_n \xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k)}{G_0^{-1}(\varepsilon_n, (-1)^k \xi_p - ik\nu_F\kappa) - \Sigma_{k+1}(\varepsilon_n \xi_p)}. \quad (17)$$

Это основная рекуррентная формула. Функция Грина представляется, таким образом, в виде цепной дроби:



$$\begin{aligned}
 & G(\varepsilon_n \xi_p) = \\
 & = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \frac{\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa - \frac{2\Delta^2}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F \kappa - \frac{2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F \kappa - \dots}}}} \\
 & \equiv \left[ 0; \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}, \frac{-\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}, \dots, \frac{-\Delta^2 v(k)}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F \kappa}, \dots \right]. \quad (18)
 \end{aligned}$$

При  $\kappa=0$  можно воспользоваться известным представлением неполной  $\Gamma$ -функции в виде цепной дроби [14]:

$$\Gamma(\alpha, x) = \int_x^\infty dt e^{-t} t^{\alpha-1} = \frac{x^\alpha e^{-x}}{x + \frac{1-\alpha}{1 + \frac{1}{x + \frac{2-\alpha}{1 + \dots}}}}, \quad (19)$$

а также соотношением  $\Gamma(0, x) = -\text{Ei}(-x)$ , чтобы убедиться, что

$$\begin{aligned}
 G(\varepsilon \xi_p)_{\kappa=0} &= \frac{\varepsilon + \xi_p}{\Delta^2} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{\Delta^2}\right) \text{Ei}\left(\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{\Delta^2}\right) = \\
 &= \int_0^\infty d\xi e^{-\xi} \frac{\varepsilon + \xi_p}{\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \xi \Delta^2} = \int_0^\infty dW P_R(W) \frac{\varepsilon + \xi_p}{\varepsilon^2 - \xi_p^2 - W^2}, \quad (20)
 \end{aligned}$$

где подразумевается обычное аналитическое продолжение  $i\varepsilon_n \rightarrow \varepsilon \pm i\delta$ . Здесь

$$P_R(W) = \frac{2W}{\Delta^2} \exp\left(-\frac{W^2}{\Delta^2}\right) \quad (21)$$

— распределение Рэля [15], описывающее однородные флуктуации полупроводниковой щели во всем пространстве. Распределение Рэля возникает из-за того, что в данном случае мы имеем дело с комплексным гауссовым случайным полем флуктуаций [15]. Таким образом, для  $\kappa=0$  получаем результат работы [6]. В общем случае ( $\kappa \neq 0$ ) нам не удалось представить (18) в каком-либо замкнутом виде, но представление в виде цепной дроби удобно для численных расчетов.

Для задачи со спектром (5) и  $2p_F = \pi/a$  (предельно соизмеримый случай, удвоение периода) аналогичным образом получаем рекуррентное соотношение (17) с  $v(k)$ , определенной в (9), так что

$$\begin{aligned}
 & G(\varepsilon_n \xi_p) = \\
 & = \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p - \frac{2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa - \frac{2 \cdot 2\Delta^2}{i\varepsilon_n - \xi_p + 2iv_F \kappa - \frac{3 \cdot 2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + 3iv_F \kappa - \dots}}}} \\
 & = \left[ 0; \frac{1}{i\varepsilon_n - \xi_p}, \frac{-2\Delta^2}{i\varepsilon_n + \xi_p + iv_F \kappa}, \dots, \frac{-k \cdot 2\Delta^2}{i\varepsilon_n - (-1)^k \xi_p + ikv_F \kappa}, \dots \right]. \quad (22)
 \end{aligned}$$



Множитель 2 перед  $\Delta^2$  здесь связан с необходимостью учета двух направлений линии взаимодействия, упоминавшейся выше.

Для  $\kappa=0$  мы снова можем воспользоваться формулой (19), чтобы после простых преобразований получить

$$G(\varepsilon \xi_p)_{\kappa=0} = -\frac{1}{2\Delta} \left( \frac{\xi_p + \varepsilon}{\xi_p - \varepsilon} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{4\Delta^2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}, -\frac{\varepsilon^2 - \xi_p^2}{4\Delta^2}\right) = \\ = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_0^\infty d\xi \exp\left(-\frac{\xi^2}{4}\right) \frac{\varepsilon + \xi_p}{\varepsilon^2 - \xi_p^2 - \xi^2 \Delta^2} = \int_{-\infty}^\infty dW P_G(W) \frac{\varepsilon + \xi_p}{\varepsilon^2 - \xi_p^2 - W^2}, \quad (23)$$

где

$$P_G(W) = \frac{1}{2\pi^{1/2}\Delta} \exp\left(-\frac{W^2}{4\Delta^2}\right), \quad (24)$$

что совпадает с результатом, полученным в [9]. Возникновение здесь гауссова распределения щелей связано с тем, что в данном случае мы имеем дело с действительным гауссовым случайным полем флуктуаций. В общем случае,  $\kappa \neq 0$ , мы также вынуждены использовать представление функции Грина в виде цепной дроби (22).

### 3. Плотность состояний

Перейдем к расчету плотности электронных состояний, соответствующей функциям Грина (18) и (22). Для задачи со спектром (4) (несоизмеримый переход) имеем:

$$\frac{N(\varepsilon)}{N_0} = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\xi_p \operatorname{Im} G^R(\varepsilon \xi_p) = \\ = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\xi_p \frac{\operatorname{Im} \Sigma_1(\varepsilon \xi_p)}{[\varepsilon - \xi_p - \operatorname{Re} \Sigma_1(\varepsilon \xi_p)]^2 + \operatorname{Im}^2 \Sigma_1(\varepsilon \xi_p)}, \quad (25)$$

где  $N_0$  — плотность состояний свободных электронов на уровне Ферми. Из основной рекуррентной формулы (17) имеем:

$$\operatorname{Re} \Sigma_k(\varepsilon \xi_p) = \frac{\Delta^2 v(k) [\varepsilon - (-1)^k \xi_p - \operatorname{Re} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k \xi_p - \operatorname{Re} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]^2 + [k v_F \kappa - \operatorname{Im} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]^2}, \quad (26) \\ \operatorname{Im} \Sigma_k(\varepsilon \xi_p) = \frac{-\Delta^2 v(k) [k v_F \kappa - \operatorname{Im} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]}{[\varepsilon - (-1)^k \xi_p - \operatorname{Re} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]^2 + [k v_F \kappa - \operatorname{Im} \Sigma_{k+1}(\varepsilon \xi_p)]^2}$$

Расчеты плотности состояний проводились на ЭВМ БЭСМ-6, сходимость итерационной процедуры (26) оказалась очень хорошей. Результаты приведены на рис. 5, где различные кривые плотности состояний соответствуют различным значениям безразмерного параметра  $\Gamma = v_F \kappa / \Delta = v_F \xi^{-1} / \Delta$ . Кривая  $\Gamma = 0$  соответствует тому случаю, когда плотность состояний может быть найдена аналитически [7]. Видно, как по мере уменьшения корреляционной длины  $\xi$  происходит постепенное зарастание псевдощели, т. е. переход к «металлическому» состоянию. При  $v_F \xi^{-1} \ll \Delta$  приближение  $\kappa = 0$  [6, 7] очень хорошо работает всюду, кроме области энергий  $\sim v_F \xi^{-1}$  вокруг уровня Ферми, что подтверждает качественные выводы



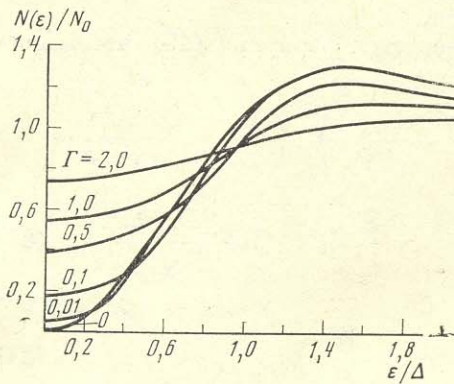


Рис. 5

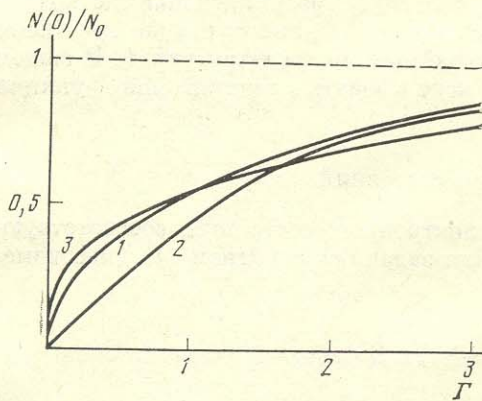


Рис. 6

предыдущих работ [6, 7]. При больших  $\Gamma \gg 2$  разница результатов работы Ли и др. [10], основанной на учете одной диаграммы рис. 1, а, и данного расчета, суммирующего все графики, становится незначительной. Основное отличие имеет место при малых  $\Gamma$ , когда подход в [10] предсказывает переход к плотности состояний типа БКШ при  $\Gamma \rightarrow 0$ .

На рис. 6 приведена зависимость плотности состояний на уровне Ферми (определяющей, например, паулиевскую парамагнитную восприимчивость) как функция параметра  $\Gamma$ : кривая 1 — наш результат, кривая 2 — результат работы [10] (пересчитанный в наших обозначениях). Видно, что заполнение псевдощели в нашей модели происходит быстрее, при  $\Gamma < 1,5$  кривая 1 аппроксимируется зависимостью  $N(0)/N_0 \approx (0,541 \pm 0,013) \Gamma^{1/2}$ .

При попытках сравнения наших результатов с экспериментом по пайерлсовскому переходу в КСР или ТТФ-ТСНҚ следует иметь в виду, что мы пренебрегли всеми негауссовскими флуктуациями, которые могут оказаться существенными при  $T \ll T_{p0}$  [11]. Рассматриваемая гауссова модель может быть применима для  $T \ll T_{p0}$ , т. е. для КСР и ТТФ-ТСНҚ при  $T \geq 200$  К во всяком случае. Из нейтроннографических и рентгеновских данных [16, 17] следует, что при этих температурах в КСР  $\xi > 10^2 a$  ( $a$  — постоянная решетки), т. е.  $\Gamma \propto \epsilon_F a / \Delta \xi < 0,1$ , что может объяснить хорошее согласие результатов, полученных в [6, 7] для оптического поглощения через псевдощель, с экспериментом на КСР [18] (см. также [8]). Общепринятой теории корреляционной длины при пайерлсовском переходе не существует. Экспериментальным данным не противоречат результаты работы Блунка [19], из которой следует, что  $\xi(300 \text{ К}) \geq 10^2 a$ ,  $\xi(200 \text{ К}) \geq 10^2 a$ , т. е.  $\Gamma(300 \text{ К}) \leq 0,1$ ,  $\Gamma(200 \text{ К}) \leq 0,01$ . Негауссовские флуктуации при  $T \ll T_{p0}$  приводит, по-видимому, к более резко выраженной псевдощели в плотности состояний [11], что видно и в оптическом эксперименте [18]. Заметим, однако, что в области температур, где экспериментально наблюдается более резкая щель, по-видимому, уже существенны эффекты трехмерного упорядочения.

Для предельно соизмеримого случая (спектр (5)) имеем:

$$\frac{N(\epsilon, W)}{N_0} = -\frac{1}{\pi} \int_{-W}^W \frac{d\xi_p}{(1 - \xi_p^2/W^2)^{1/2}} \frac{\text{Im} \Sigma_1(\epsilon \xi_p)}{[\epsilon - \xi_p - \text{Re} \Sigma_1(\epsilon \xi_p)]^2 + \text{Im}^2 \Sigma_1(\epsilon \xi_p)} \quad (27)$$



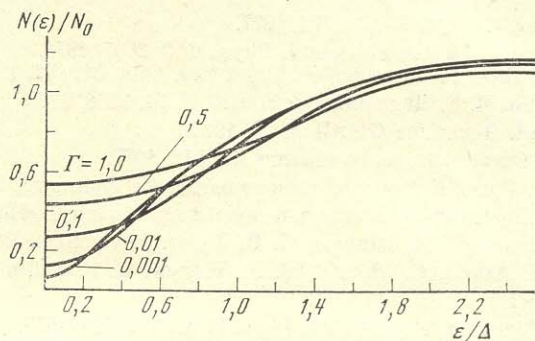


Рис. 7

Итерационная процедура определяется формулами (26) с заменой  $v(k) \rightarrow 2k$ . На рис. 7 приведены результаты расчетов плотности состояний для случая  $W \rightarrow \infty$  (бесконечно широкая зона), который проще сравнивать с рассмотренным выше случаем почти свободных электронов. При конечных значениях  $W$  возникает характерный пик плотности состояний при  $\epsilon = W$  [9], связанный с размытием особенности на границе зоны одномерного металла. При этом, в случае  $W \gg \Delta$ , вид плотности состояний при  $\epsilon \ll \Delta$  практически не отличается от полученного в пределе  $W \rightarrow \infty$ , а именно эта область представляет для нас главный интерес. Снова видно, как с уменьшением  $\xi$  происходит плавный переход к металлическому состоянию. Плотность состояний на уровне Ферми как функция  $\Gamma$  показана для этой задачи кривой 3 на рис. 6.

Опять легко проследить переход к случаю  $\Gamma = 0$ , когда задача решается аналитически [9]; это приближение хорошо работает при выполнении неравенств (7). Кривая 3 при  $\Gamma < 3$  аппроксимируется зависимостью  $(0,546 \pm 0,016)\Gamma^{1/2}$ . Любопытно отметить совпадение констант в зависимостях плотности состояний на уровне Ферми от параметра  $\Gamma$  для двух различных задач. В рассматриваемом (соизмеримом) случае псевдощель в плотности состояний оказывается менее ярко выраженной, заполнение ее при уменьшении  $\xi$  происходит существенно быстрее, чем в рассмотренном выше несоизмеримом случае, а критерий применимости приближения  $\Gamma = 0$  в этом случае более жесткий количественно, хотя качественно он снова выражается неравенствами (7).

В заключение автор выражает свою глубокую признательность Б. М. Летфулову за проведение численных расчетов. Он также признателен С. А. Бразовскому и Л. В. Келдышу за обсуждения и интерес к данной работе.

Институт физики металлов  
Уральского научного центра  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
24 мая 1979 г.

#### Литература

- [1] В. И. Halperin. Adv. Chem. Phys., **13**, 123, 1968.
- [2] В. Л. Березинский. ЖЭТФ, **64**, 1251, 1973.
- [3] А. А. Abrikosov, I. A. Ryzhkin. Adv. Phys., **27**, 147, 1978.
- [4] А. А. Овчинников, Н. С. Эрихман. ЖЭТФ, **73**, 650, 1977.
- [5] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский. Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, 1963.
- [6] М. В. Садовский. ЖЭТФ, **66**, 1720, 1974.
- [7] М. В. Садовский. ФТТ, **16**, 2504, 1974.



- [8] W. Wonneberger. J. Phys. C, **10**, 1073, 1977.  
[9] W. Wonneberger, R. Lautenschlager. J. Phys., C, **9**, 2865, 1976.  
[10] P. A. Lee, T. M. Rice, P. W. Anderson. Phys. Rev. Lett., **31**, 462, 1973.  
[11] С. А. Бразовский, И. Е. Дзялошинский. ЖЭТФ, **71**, 2338, 1976.  
[12] М. В. Садовский. Препринт ФИАН № 63, 1973.  
[13] П. В. Елютин. Оптика и спектроскопия, **43**, 542, 1977.  
[14] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, **2**, «Наука», 1974.  
[15] С. М. Рытов. Введение в статистическую радиофизику, «Наука», 1966.  
[16] R. Comes, M. Lambert, H. Launois, H. R. Zeller. Phys. Rev., **B8**, 571, 1973.  
[17] J. W. Lynn, M. Iizumi, G. Shirane, S. A. Werner, R. B. Saillant. Phys. Rev., **B12**, 219, 1975.  
[18] P. Bruesch, S. Strassler, H. R. Zeller. Phys. Rev., **B12**, 219, 1975.  
[19] M. Blunck. Phys. Lett., **62A**, 237, 1978; Zs. Physik, **B31**, 1, 1978.

---

EXACT SOLUTION FOR THE ELECTRON DENSITY OF STATES  
IN A CERTAIN MODEL OF A DISORDERED SYSTEM

*M. V. Sadovsky*

A one-dimensional system is considered of electrons located in a gaussian random field with a correlator possessing (in momentum space) the form of a lorentzian with a center at  $Q=2p_F$ . The model may be regarded as a gaussian model of a Peierls transition in the fluctuation region. An exact summation of all Feynman diagrams is performed and the representation of the averaged one-electron Green function in the form of a continued fraction is obtained. The density of states with a characteristic pseudogap is found. It is shown that on decrease of the range of the short-range correlations the pseudogap is gradually filled up and a transition to the metallic state occurs.

---