

## КУЛОНОВСКАЯ ЩЕЛЬ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ

*Б.Л.Гельмонт, А.Л.Эфрос*

С помощью машинного эксперимента изучена одномерная неупорядоченная система локализованных электронов с дальнедействующим взаимодействием. Показано, что существует "мягкая" щель в плотности состояний в окрестности уровня Ферми. Самосогласованное уравнение хорошо описывает экспериментальную кривую.

В [1,2] было показано, что благодаря электрон-электронному взаимодействию плотность состояний (ПС) заряженных возбуждений в неупорядоченной системе с локализованными состояниями обращается в нуль, когда энергия стремится к энергии Ферми. Это приводит, например, к изменению температурной зависимости проводимости при низких температурах. В настоящей работе поведение ПС вблизи уровня Ферми исследовано с помощью эксперимента на ЭВМ.

В [2] была предложена сравнительно простая модель неупорядоченной системы. В этой модели электроны могут занимать только узлы простой периодической решетки. Для сохранения нейтральности заряд узла считается равным  $1/2$ , если узел пуст, и  $-1/2$ , если узел занят электроном, причем полное число электронов вдвое меньше числа узлов. Энергия электрона на каждом узле состоит из случайной величины  $\phi_i$  и потенциала, создаваемого на этом узле всеми прочими узлами

$$\epsilon_i = \phi_i + \sum_j e_{ij} n_j. \quad (1)$$

Величины  $\phi_i$  равномерно распределены в интервале от  $-A$  до  $A$ .  $e_{ij}$  – энергия взаимодействия электронов, число заполнения  $n_i = 1/2$ , если узел заполнен, и  $n_i = -1/2$ , если узел пуст. Полная энергия системы

имеет вид

$$H = \sum_i \phi_i \left( n_i + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} e_{ij} n_i n_j \dots \quad (2)$$

Задача состоит в том, чтобы найти набор  $\{n_i\}$ , минимизирующий полную энергию при заданной реализации  $\{\phi_i\}$  и при условии, что  $\sum n_i = 0$ , а также ПС  $g(\epsilon)$ , соответствующую этому набору. Из симметрии задачи следует, что  $g(\epsilon) = g(-\epsilon)$  и что уровень Ферми равен нулю, т. е. все узлы с  $\epsilon_i < 0$  в основном состоянии заполнены, а узлы с  $\epsilon_i > 0$  — пусты.

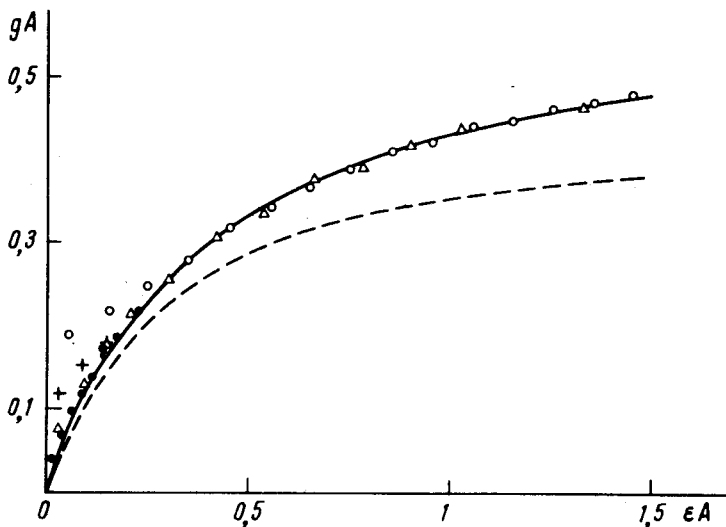
В этой статье мы приведем результаты численного эксперимента на одномерной модели, когда потенциал взаимодействия имеет вид  $e_{ij} = |i - j|^{-1/2}$ , где  $i$  и  $j$  — координаты узлов. (Взаимодействие  $e_{ij} = \frac{i-j-1}{i-j}$  не ведет к щели в одномерной модели [2]). Прямую минимизацию полной энергии (2) с заданными  $\phi_i$  трудно осуществить на ЭВМ для цепочки, состоящей из достаточно большого количества узлов. Поэтому мы воспользовались явным видом функции распределения  $\rho(\epsilon_1 \dots \epsilon_N)$  всех энергий цепочки из  $N$  узлов, полученным в [2] (формула (12)). Эта функция равна  $(2A)^{-N}$ , если энергия удовлетворяет всевозможным неравенствам, требующим положительного приращения энергии при перестановке любого числа электронов. Области, где хотя бы одно из неравенств не удовлетворяется, являются запрещенными, и в них  $\rho = 0$ . В частности, неравенство, соответствующее переносу одного электрона

$$\epsilon_j - \epsilon_i - \epsilon_{ij} > 0, \quad (3)$$

должно выполняться для всех  $\epsilon_j > 0$  и  $\epsilon_i < 0$ . Наш эксперимент состоял в том, что мы строили реализации указанной выше функции распределения, учитывая неравенства, связанные с всевозможными перестановками одного электрона (ОЭ приближение) и двух электронов (ДЭ приближение). Приведем для примера программу ОЭ приближения. На первом узле цепочки, состоящей из  $N$  узлов, датчик случайных чисел с равномерным распределением от  $-A$  до  $A$  генерировал число  $\epsilon_1$ . Это число и координата фиксировались в памяти ЭВМ. Затем на втором узле генерировалось число  $\epsilon_2$ , которое запоминалось лишь, если  $\epsilon_2$  и  $\epsilon_1$  удовлетворяли (3). В противном случае  $\epsilon_2$  исчезало, и переходило к следующему узлу. Число, полученное на узле  $i$ , проверялось на предмет выполнения (3) со всеми числами  $\epsilon_j$ , которые были генерированы и зафиксированы в памяти ранее. При положительном исходе  $\epsilon_i$  фиксировалось, при отрицательном — выбрасывалось. После перебора всех  $N$  узлов в памяти ЭВМ оставался набор энергий, удовлетворяющий нужным требованиям. Потом вычислялось количество уровней, попавших в каждый из заранее заданных интервалов, и получалась гистограмма ПС  $g(\epsilon)$ . Число  $N$  менялось от 100 до  $6 \cdot 10^4$ . При каждом  $N$  процедура повторялась столько раз, что полное число узлов, участвовавших в усреднении, было порядка нескольких миллионов. Число  $A$  менялось от 1 до 6. Программа ДЭ строилась аналогично. Мы убеждались в том, что результат не зависит от последовательности перебора узлов. Для этого служила программа, в которой узлы проходились не последовательно слева направо, а в случайном порядке. Наконец, была программа, которая после выработки набора  $\{\epsilon_i\}$

строила набор  $\{\phi_i\}$  по формуле (1), учитывая, что  $n_i = 1/2$ , если  $\epsilon_i < 0$ , и  $n_i = -1/2$ , если  $\epsilon_i > 0$ . Распределение  $\{\phi_i\}$  действительно оказалось равномерным. Результаты эксперимента состоят в следующем:

1. Результаты ОЭ и ДЭ приближений в пределах точности расчета (10%) не отличались друг от друга. Это соответствует приведенным в [2] оценкам и позволяет надеяться, что ОЭ приближение является достаточно хорошим.



Результаты эксперимента на ЭВМ при  $A = 3$  и  $N = 100$  (o),  $N = 400$  (+),  $N = 2 \cdot 10^3$  ( $\Delta$ ) и  $N = 2 \cdot 10^4$  (\*). Сплошная кривая — численное решение (4), учитывающее дискретность решетки, пунктир — решение (4) в континуальном приближении (замена суммы интегралом)

2. ПС  $g(\epsilon)$  при малых  $\epsilon A$  имеет щель, точно соответствующую предсказаниям [2] (см. рисунок). Мы решили численно самосогласованное уравнение для ПС [2], которое с учетом дискретности цепочки имеет вид

$$\ln [2Ag(\epsilon)] = - \sum_{i < 1/\epsilon^2} \frac{1}{\sqrt{i} - \epsilon} \int_0^\epsilon g(\epsilon^*) d\epsilon^*. \quad (4)$$

Оказалось, что при тех энергиях, при которых конечный размер цепочки не сказывается на ПС, результат нашего эксперимента не отличается от решения (4). Такое хорошее согласие служит косвенным доказательством справедливости уравнения (4), поскольку мы не можем показать, что оно является точным.

3. Благодаря конечности цепочки, при  $\epsilon \rightarrow 0$  ПС не обращается в нуль, а имеет конечное значение  $g(0)$ . Как видно из рисунка, конечность цепочки сказывается лишь при малых  $\epsilon$ , т. е. радиус корреляции  $R_\epsilon$  растет при  $\epsilon \rightarrow 0$ . Согласно теории [2] в бесконечной цепочке при  $\epsilon \rightarrow 0$  имеем  $g(\epsilon) = \epsilon$ ,  $R_\epsilon \sim \epsilon^{-2}$ . Отсюда следует, что в конечной цепочке  $g(0) \sim 1/\sqrt{N}$ .

Из теории также следует, что при малых  $\epsilon$  ПС имеет универсальный вид, определяемый лишь взаимодействием и числом измерений пространства и не зависящий от  $A$ , т. е. что  $g(0)$  не зависит от  $A$ . Как видно из таблицы, эти выводы подтверждаются в пределах точности эксперимента.

$A$	3	3	3	3	6
$N$	$6 \cdot 10^3$	$10^4$	$1,5 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^4$	$6 \cdot 10^4$
$g(0)\sqrt{N}$	1,0	1,0	1,0	1,1	1,0

Физико-технический институт  
им. А.Ф.Иоффе  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
22 ноября 1976 г.

### Литература

- [1] A.L.Efros, B.I.Shklovskii. J. Phys., C8, 49, 1975.  
[2] A.L.Efros. J. Phys., C9, 2021, 1976.