*Письма в ЖЭТФ, том 21, вып. 2, стр. 105 – 107* *20 января 1975 г.*

# О ПОВЕДЕНИИ ПЛОТНОСТИ УРОВНЕЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ЦЕПОЧКАХ

*И.З.Костадинов*

В последние годы был достигнут значительный прогресс в изучении как плотности уровней, так и проводимости одномерных неупорядоченных систем. В работе Бычкова [1] было показано, что статическая проводимость отсутствует и тем самым было получено иное доказательство теоремы Мотта – Борланда [2, 3], утверждающей, что все электронные уровни в одномерных неупорядоченных системах – непроводящие. В работе Березинского [4] было получено, что проводимость $\sigma(\omega)$ обращается в ноль при $\omega \to 0$ по закону $\omega^2 \ln^2 \omega$, как это предсказал Мотт [5]. В другой работе Бычкова [6] было получено выражение для плотности уровней $N(E)$ в неупорядоченной цепочке с потенциалом

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} U_n \delta(x - na),$$

где случайные интенсивности рассеивателей $U_n$ распределены по закону Коши (ср. [7])

$$P(U_n) = a\ [(U_n - U_0)^2 + a^2]^{-1}/\pi .$$

Результат Бычкова сводится к тому, что в отличие от упорядоченной системы интенсивность рассеивателей в неупорядоченной системе комплексна $U_0 \to U_0 - ia$. При этом оказалось, что корневые особенности $N(E)$, присутствующие в кристаллах, сохраняются при энергиях электрона $ka = n\pi$, $\hbar k = \sqrt{2mE}$, $n = 1, 2, 3\ldots$ . Овчинниковым [8] было показано, что эти особенности остаются и в трехмерной системе этого вида. Оставалось неясным, однако, насколько этот результат зависит от выбора модели и являются ли особенности в плотности уровней $N(E)$ физическими.

Здесь мы приведем более точную картину поведения $N(E)$, чем в работе Бычкова,и покажем, что особенности $N(E)$ связаны с выбором модели, поскольку в цепочке с двумя атомами в элементарной ячейке $N(E)$ вовсе не имеет особенностей.

Действительно, следуя Бычкову [6],мы получаем, что плотность уровней в расчете на один центр имеет вид

$$N(\xi) = \frac{ma^2}{\pi\hbar^2}\left|(1+\frac{\lambda}{\xi^2})\sin\xi - \frac{\lambda\sin\xi}{\xi}\right| \mathrm{Im}\left[\left(\cos\xi + \frac{\lambda - i\mu}{\xi}\sin\xi\right)^2 - 1\right]^{-1/2}, \tag{1}$$

где $\xi = ka$, $\lambda - i\mu = (U_o - ia)ma/\pi\hbar^2$.


Плотность уровней в неупорядоченной цепочке типа Кронига – Пенни. Особенности на верхних краях энергетических зон являются следствием выбора распределения Коши. На нижних краях зон $N(\xi)$ имеет конечные максимумы

Поведение этой величины показано на рисунке. Видно, что $N(\xi)$ имеет особенности только на верхних краях энергетических зон, тогда как на нижних $N(\xi)$ имеет конечные максимумы, в чем и состоит отличие от работы Бычкова, где эти максимумы не представлены. Заметим, что сохранение особенностей на верхних краях зон имеет случайный характер и связано с обращением в ноль $\sin\xi$, на который множится параметр неупорядоченности" $\mu$.

Рассмотрим теперь цепочку с двумя "атомами" в элементарной ячейке с потенциалом вида

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [U_n\delta(x-na) + V_n\delta(x-na-b)].$$

Интенсивности рассеивателей типа $U$ и $V$ распределены по закону Коши с параметрами $U_o$, $a$ и $V_o$, $\beta$ соответственно. Производя усреднение как и в работе Овчинникова [8], т. е. используя Фейнмановский интеграл по траекториям для Гриновской функции и равенство

$$< \exp[i \sum_{n=-\infty}^{+\infty} F_n U_n] > = \exp[i \sum_{n=-\infty}^{+\infty} (U_o - ia)F_n],$$

справедливое для положительно определенных функционалов $F_n = \int \delta(x(t) - na)dt$ получим, что плотность уровней имеет вид

$$N(\xi) = \frac{ma^2}{\pi\hbar^2} \left| \mathrm{Re}\, F'(\xi) \right| \mathrm{Im}[F^2(\xi) - 1]^{-1/2}, \tag{2}$$

где

$$F(\xi) = \cos\xi - \frac{AB}{\xi^2}\left[(\cos\xi - \cos\xi\left(1 - \frac{2b}{a}\right)\right] + (A + B)\frac{\sin\xi}{\xi} \tag{3}$$

и

$$A = (U_o - i\alpha)\, ma/2\pi\hbar^2, \quad B = (V_o - i\beta)\, ma/2\pi\hbar^2.$$

Наличие корневых особенностей в $N(\xi)$ означало бы, что одновременно $(\mathrm{Re}\, F(\xi))^2 = 1$ и $\mathrm{Im} F(\xi) = 0$, что невозможно для всех зон одновременно. Таким образом $N(\xi)$ для цепочки с двумя атомами в элементарной ячейке не имеет корневых особенностей для того же распределения Коши. Следовательно особенности, характерные для простой ценочки исчезают в более обшей модели.

Софийский университет
физический факультет
кафедра теоретической физики

Поступила в редакцию
7 ноября 1974 г.

## Литература

[1] Ю.А.Бычков. ЖЭТФ, 65, 427, 1973.

[2] N.F.Mott, W.D.Twose. Adv. Phys., 10, 107, 1961. (русский перевод Н.Мотт и У.Туз, УФН, 79, 691, 1963).

[3] R.E.Borland. Proc. Roy. Soc. (London), A274, 529, 1963.

[4] В.Л.Березинский. ЖЭТФ, 65, 1251, 1973.

[5] N.F.Mott. Phil. Mag., 19, 835, 1969.

[6] Ю.А.Бычков. Письма в ЖЭТФ, 17, 269, 1973.

[7] P. Lloyd. J. Phys., C, 2, 1717, 1969.

[8] А.А.Овчинников. Письма в ЖЭТФ, 18, 145, 1973.