ЕНЕРҐЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ГУСТИНА СТАНІВ ЕЛЕКТРОНІВ З ДІЯГОНАЛЬНИМ БЕЗЛАДОМ НА ПРЯМОКУТНІЙ ДРАБИНЦІ В МАГНЕТНОМУ ПОЛІ

О. М. Возняк
Прикарпатський університет імені Василя Стефаника, кафедра фізики твердого тіла, вул. Шевченка, 57, Івано–Франківськ, 284025, Україна

(Отримано 22 грудня 1997 р.; в остаточному вигляді — 11 травня 1998 р.)

Одержано вирази для функцій Ґріна електронів подвійного ланцюжка в магнетному полі, коли енергія на вузлі є випадковою величиною. Розраховано енерґетичний спектр, його загасання та густину станів такої системи.

Ключові слова: електронний спектр, густина станів, діягональний безлад, магнетне поле.

PACS number(s): 71.10.+x, 71.20.–b

Відомо, що коли електрони перебувають під одночасним впливом магнетного поля й періодичного потенціялу, то їхні енерґетичні зони є складними й утворюють ряд підзон [1–3]. Ці проблеми знову привернули до себе увагу після відкриття квантового ефекту Холла [4]. Різні автори вивчали властивості таких систем, умови застосування до них наближених методів, досліджували модельні системи [6–10].

Ця робота присвячена вивченню енерґетичного спектра та густини станів електронів, що перебувають у магнетному полі, а їхня енергія на вузлі є випадковою величиною (діягональний безлад). Напрям магнетного поля вибраний так, що воно є паралельним до одного з кристалографічних напрямків кристала, і тому це поле впливає на рух електронів лише в кристалографічних площинах, перпендикулярних до вибраного напрямку. Тим самим задача, по суті, стає двовимірною.

Вибираючи базисними функціями в представленні вторинного квантування атомні хвильові функції, нехтуючи їх зміною в магнетному полі та вважаючи зміну векторного потенціялу в межах атома малою, можна записати гамільтоніян у такому вигляді

$$\hat{H}=\sum_i \varepsilon_i a_i^+ a_i+\frac{1}{2}\sum_{i,j} e^{i\frac{e}{\hbar}\mathbf{A}_j(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)}V_{ij}a_i^+a_j+\text{e.c.},\quad (1)$$

де $a_i^+(a_i)$ — оператор породження (знищення) електрона на вузлі i, ε_i — енергія електрона на i–му вузлі, V_{ij} — матричний елемент переходу електрона з i–го вузла на j–ий, $\mathbf{R_i}(\mathbf{R_j})$ — двовимірний радіус–вектор $i(j)$–го вузла, $\mathbf{A_j}$ — значення векторного потеціялу на вузлі j. Вибираючи векторний потенціял у вигляді

$$A_j^x=-By,\ A_j^y=A_j^z=0,$$

що відповідає магнетному полю B, напрямленому вздовж осі OZ, і враховуючи вплив лише найближчих сусідів, одержимо відомий гамільтоніян (див., наприклад, [8, 10])

$$\hat{H}=\sum_{i,n}\varepsilon_{i,n}a_{i,n}^+a_{i,n}+\frac{1}{2}\sum_{n,i}e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n}V_1 a_{i+1,n}^+a_{i,n}$$
$$+\sum_{n,i}V_2 a_{i,n}^+a_{i,n+1}+\text{e.c.},\quad (2)$$

де i нумерують вузли в ланцюжках, паралельних до векторного потенціялу, n нумерує ланцюжки, Φ — магнетний потік через елементарну комірку двовимірної ґратки, перпендикулярної до магнетного поля, $\Phi_0=hc/e$ — квант магнетного потоку, $V_1(V_2)$ — матричний елемент переходу між вузлами ланцюжка (різних ланцюжків).

Для дослідження енерґетичного спектра, його загасання та густини станів розглянемо функцію Ґріна

$$G_{i,j}^{n,m}(E)=\langle\langle a_{i,n},a_{j,m}^+\rangle\rangle,\quad (3)$$

рівняння для якої з гамільтоніяном (2) в енерґетичному представленні має вигляд

$$EG_{i,j}^{n,m}(E)=\delta_{i,j}\delta_{n,m}+\varepsilon_{i,n}G_{i,j}^{n,m}(E)$$
$$+V_1 e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n}G_{i-1,j}^{n,m}(E)+V_1^* e^{-i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n}G_{i+1,j}^{n,m}(E)$$
$$+V_2 G_{i,j}^{n+1,m}(E)+V_2^* G_{i,j}^{n-1,m}(E).\quad (4)$$

Зважаючи, що енерґія електрона на i-му вузлі n-го ланцюжка $\varepsilon_{i,n}$ є величиною випадковою, запишемо її в такій формі

$$\varepsilon_{i,n}=\varepsilon_0+\Delta\varepsilon_i^n,$$

де $\varepsilon_0=\langle\varepsilon_{i,n}\rangle$ — усереднена за всіма вузлами енергія електрона, $\Delta\varepsilon_i^n$ — флюктуації енерґії на i–му вузлі n–го ланцюжка.

Здійснивши перехід у k–простір, одержимо рівняння для функції Ґріна

$$G_{k,k'}^{n,m} = \frac{1}{N}\sum_{i,j} e^{-ikR_i} G_{i,j}^{n,m} e^{ikR_j} \tag{5}$$

($R_i,\ R_j$ тут напрямлені вздовж паралельних ланцюжків),

$$\left(E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos\Big(k - 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n\Big)\right) G_{k,k'}^{n,m}(E) = \delta_{k,k'}\delta_{n,m} + V_2 G_{k,k'}^{n+1,m}(E) + V_2^* G_{k,k'}^{n-1,m}(E)$$

$$+\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*} \Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n} G_{k,k'}^{n,m}(E), \tag{6}$$

у яких $\Delta\varepsilon_k^n$ — фур'є–компонента флюктуацій енерґії на вузлі.

Ці рівняння пов'язують функції Ґріна $G_{k,k'}^{n,m}(E)$ з функціями Ґріна $G_{k,k'}^{n-1,m}(E)$ і $G_{k,k'}^{n+1,m}(E)$ і містять доданки, що враховують флюктуації енерґії електрона на вузлах. Уважаючи, що енерґія на всіх вузлах однакова і дорівнює ε_0, прийдемо до "квазікристалічного" наближення, яке відповідає рівнянню Гарпера [5].

Рівняння (6) є системою N рівнянь і в загальному випадку можуть бути розв'язані чисельно, при тому для обмежених N. Безпосереднім обчисленням їх можна розв'язати лише для деяких найпростіших випадків. У нашій роботі розв'язано рівняння (6) для випадку, коли кожен ланцюжок містить N вузлів ($i, j = 1, \ldots, N$), а кількість ланцюжків дорівнює двом ($n = 2$). Тоді матимемо таку систему двох рівнянь:

$$\left(E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos\left(k - 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right) G_{k,k'}^{1,m}(E) = \delta_{k,k'}\delta_{1,m} + V_2 G_{k,k'}^{2,m}(E) + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*}\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{1} G_{k^*,k'}^{1,m}(E),$$

$$\left(E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos\left(k - 4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right) G_{k,k'}^{2,m}(E) = \delta_{k,k'}\delta_{2,m} + V_2^* G_{k,k'}^{1,m}(E) + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*}\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{2} G_{k^*,k'}^{2,m}(E). \tag{7}$$

Оскільки експериментально спостерігаємо лише усереднені характеристики макроскопічної системи, то розглядатимемо усереднені за всіма можливими флюктуаціями енерґії функцій Ґріна $\overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}$, рівняння для яких одержимо, здійснивши конфіґураційні усереднення рівнянь (7). Тоді

$$\left(E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos\left(k - 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right) \overline{G_{k,k'}^{1,m}(E)} = \delta_{k,k'}\delta_{1,m} + V_2 \overline{G_{k,k'}^{2,m}(E)} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{1} G_{k^*,k'}^{1,m}(E)},$$

$$\left(E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos\left(k - 4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right) \overline{G_{k,k'}^{2,m}(E)} = \delta_{k,k'}\delta_{2,m} + V_2^* \overline{G_{k,k'}^{1,m}(E)} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{2} G_{k^*,k'}^{2,m}(E)}.$$

Кожне з цих рівнянь містить конструкції $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n} G_{k^*,k'}^{n,m}(E)}$, рівняння для яких треба також записати. Для цього кожне з рівнянь (7) поділимо на відповідні величини $E - \varepsilon_0 - 2V_1\cos(k - 2\pi(\Phi/\Phi_0)n)$, домножимо на відповідні $\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n}$ і усереднимо. Одержимо два рівняння для величин $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{1} G_{k^*,k'}^{1,m}(E)}$ і $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{2} G_{k^*,k'}^{2,m}(E)}$, що в свою чергу містять $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{1} G_{k^*,k'}^{2,m}(E)}$ і $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{2} G_{k^*,k'}^{1,m}(E)}$, для яких знову слід записати рівняння, а також $\frac{1}{N}\sum_{k_1}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n}\Delta\varepsilon_{k^*-k_1}^{n} G_{k_1,k'}^{n,m}(E)}$. Для останніх використаємо наближення, що було запропоноване в теорії аморфних магнетиків [11] і широко використовується в теорії невпорядкованих електронних та фононних систем [12]

$$\frac{1}{N}\sum_{k_1}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n}\Delta\varepsilon_{k^*-k_1}^{n} G_{k_1,k'}^{n,m}(E)} \approx \frac{1}{N}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^{n}\Delta\varepsilon_{k^*-k}^{n}}\cdot\overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}.$$

Тоді прийдемо до таких рівнянь для усереднених функцій Ґріна:

$$\left(E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)-\Sigma_k^{(1)}(E)\right)\overline{G_{k,k'}^{1,m}(E)}-V_2\overline{G_{k,k'}^{2,m}(E)}=\delta_{k,k'}\delta_{1,m},$$
$$\left(E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)-\Sigma_k^{(2)}(E)\right)\overline{G_{k,k'}^{2,m}(E)}-V_2^*\overline{G_{k,k'}^{1,m}(E)}=\delta_{k,k'}\delta_{2,m},\tag{8}$$

де

$$\Sigma_k^{(n)}(E)=\frac{1}{N}\sum_{k^*}\frac{\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}}{E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n\right)-\dfrac{|V_2|^2}{E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}m\right)}},$$

$m=2$, якщо $n=1$, і $m=1$, якщо $n=2$.

Доданки $\Sigma_k^{(n)}(E)$ в рівняннях за своїм змістом відповідають другому порядкові теорії збурень за флюктуаціями енергії електрона на вузлі $\Delta\varepsilon_i^n$. Вважаючи їх малими, можна припустити, що $\Sigma_k^{(n)}(E)$ є невеликим додатком до E і відіграє ту ж роль, що і масовий оператор квантової теорії поля. Він має стрибок на дійсній осі, для виділення якого замінимо $E=E+i\delta$. Тоді

$$\Sigma_k^{(n)}(E)=\Sigma_k^{(n)'}-i\Sigma_k^{(n)''},$$

де

$$\Sigma_k^{(n)'}(E)=\frac{1}{N}\mathcal{P}$$
$$\times\sum_{k^*}\frac{\left(E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}m\right)\right)\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}}{(E-\varepsilon_0)^2-2(E-\varepsilon_0)V_1\left(\cos(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0})+\cos(k^*-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0})\right)+4V_1^2\cos(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0})\cos(k^*-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0})-|V_2|^2},$$

а

$$\Sigma_k^{(n)''}(E)=\frac{\pi}{N}\sum_{k^*}\left(E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}m\right)\right)\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}\delta\left((E-\varepsilon_0)^2-|V_2|^2\right.$$
$$\left.-2(E-\varepsilon_0)V_1\left(\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)+\cos\left(k^*-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right)+4V_1^2\cos\left(k^*-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\cos\left(k^*-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right).$$

Виконавши конфіґураційне усереднення величин $\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n$ з ваговою функцією Ґауса

$$f(\Delta\varepsilon_i^n)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}e^{-(\Delta\varepsilon_i^n)^2/2\sigma},$$

де $\sigma=\langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle$, одержимо, що

$$\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}=\langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle.$$

У цій роботі ми розглядаємо випадок, коли $\Phi/\Phi_0=1/2$, що суттєво спрощує аналітичні розрахунки. Тоді

$$\Sigma_k^{(1)'}(E)=\Sigma_k^{(2)'}(E)=\frac{\langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle}{\sqrt{(E-\varepsilon_0)^2-|V_2|^2}}\frac{(E-\varepsilon_0)}{\sqrt{(E-\varepsilon_0)^2-|V_2|^2-4V_1^2}}\tag{9}$$

за умови, що $(E-\varepsilon_0)^2>4V_1^2+|V_2|^2$, яка відповідає випадкові, коли енергія електрона перевищує значення верхньої межі зони, розрахованої в нульовому наближенні (див. (12))

$$\Sigma_k^{(1)''}(E) = \Sigma_k^{(2)''}(E) = \frac{\langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle}{\sqrt{(E-\varepsilon_0)^2 - |V_2|^2}} \frac{(E-\varepsilon_0)}{\sqrt{4V_1^2 + |V_2|^2 - (E-\varepsilon_0)^2}}, \tag{10}$$

для $|V_2|^2 < (E-\varepsilon_0)^2 < 4V_1^2 + |V_2|^2$, що відповідає ситуації, коли енергія електрона знаходиться всередині смуги енергій спектра електрона в нульовому наближенні.

Енерґетичний спектр і його загасання визначаються полюсами функцій Ґріна. Рівняння для спектра має вигляд

$$(E-\varepsilon_0)^2 - 2(E-\varepsilon_0)\Sigma_k - 4V_1^2 \cos k^2 - |V_2|^2 = 0. \tag{11}$$

У нульовому наближенні, знехтувавши доданком Σ_k, для спектра одержуємо

$$E_0(k) = \varepsilon_0 \pm \sqrt{4V_1^2 \cos^2 k + |V_2|^2}. \tag{12}$$

Загасання в цьому випадку відсутнє.

У наближенні, квадратичному за флюктуаціями енергії, поправки до спектра відсутні, а його загасання має такий вигляд:

$$\Gamma = \langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle \frac{\sqrt{4V_1^2 \cos^2 k + |V_2|^2}}{4V_1^2 \cos k \sin k}. \tag{13}$$

З цього виразу випливає, що загасання необмежено зростає на краях енерґетичних зон $E = \varepsilon_0 \pm |V_2|$ і $E = \varepsilon_0 \pm \sqrt{4V_1^2 + |V_2|^2}$. Це зростання, очевидно, свідчить про те, що саме на краях зон колективні електронні збудження не є добре визначеними.

Густину станів електронів знайдемо, узявши шпур від суми уявних частин функцій Ґріна $\overline{G_{k,k}^{1,1}}$ і $\overline{G_{k,k}^{2,2}}$

$$\overline{G_{k,k}^{n,n}(E)} = \frac{E - \varepsilon_0 \pm 2V_1 \cos k - \Sigma_k(E)}{(E-\varepsilon_0 - 2V_1\cos k - \Sigma_k(E))(E - \varepsilon_0 + 2V_1 \cos k - \Sigma_k(E)) - |V_2|^2}.$$

Знак "+" стосується функції $G_{k,k}^{2,2}$, а "−" — функції $G_{k,k}^{1,1}$. Знехтувавши масовим оператором, одержимо в нульовому наближенні вираз

$$\frac{\rho_0(E)}{N} = \frac{1}{\pi} \frac{4|E-\varepsilon_0|}{\sqrt{(E-\varepsilon_0)^2 - |V_2|^2}\sqrt{4V_1^2 + |V_2|^2 - (E-\varepsilon_0)^2}}, \tag{14}$$

який відрізняється від відповідного виразу при відсутності поля

$$\left.\frac{\rho_0(E)}{N}\right|_{\frac{\Phi}{\Phi_0}=0} = \frac{1}{\pi}\left\{\frac{1}{\sqrt{4V_1^2 - (E-\varepsilon_0+|V_2|)^2}} + \frac{1}{\sqrt{4V_1^2 - (E-\varepsilon_0-|V_2|)^2}}\right\}. \tag{15}$$

Аналіз цих виразів показує, що і густина станів на границях зон також прямує до нескінченности. З урахованим загасанням вираз для густини станів має вигляд

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi}\sum_k \left\{\frac{\Sigma''(E)}{(E-\varepsilon_0 - \sqrt{4V_1^2\cos^2 k + |V_2|^2})^2 + (\Sigma''(E))^2} + \frac{\Sigma''(E)}{(E-\varepsilon_0 + \sqrt{4V_1^2\cos^2 k + |V_2|^2})^2 + (\Sigma''(E))^2}\right\}.$$

Записавши цей вираз у формі

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi}\int d\varepsilon \frac{\Sigma''(E)}{(E-\varepsilon_0-\varepsilon)^2 + (\Sigma''(E))^2}\left\{\sum_k \delta(\varepsilon - \sqrt{4V_1^2\cos^2 k + |V_2|^2}) + \sum_k \delta(\varepsilon + \sqrt{4V_1^2 \cos^2 k + |V_2|^2})\right\},$$

одержимо формулу для $\rho(E)$, що містить $\rho_0(E)$,

$$\frac{\rho(E)}{N} = \int d\varepsilon \frac{\Sigma''(E)}{(E-\varepsilon_0-\varepsilon)^2 + (\Sigma''(E))^2} \frac{\rho_0(\varepsilon)}{N}. \qquad (16)$$

Результати числового розрахунку густини станів для енерґетичної зони, що лежить у додатній області енергій, зображено на рис. 1.

Аналіз графіків показує, що зростання безладу приводить до збільшення густини станів усередині зон і зменшення її на краях зон. Зауважимо, що, на жаль, наближення, які використані в роботі, приводять до порушення умови нормування густини станів, яке тим сильніше, чим більший безлад. Тому результати достовірніші в тому випадку, коли безлад невеликий.

Цікавим є дослідження систем, які містять більшу кількість ланцюжків при довільному відношенні Φ/Φ_0, що буде предметом окремого дослідження.

Робота виконана під час стажування при кафедрі теоретичної фізики Львівського державного університету імені Івана Франка. Автор висловлює подяку всім співробітникам кафедри і особливо професорові Вакарчукові І. О. та доцентові Ткачукові В. М. за всесторонню допомогу при виконанні роботи і обговоренні її результатів.

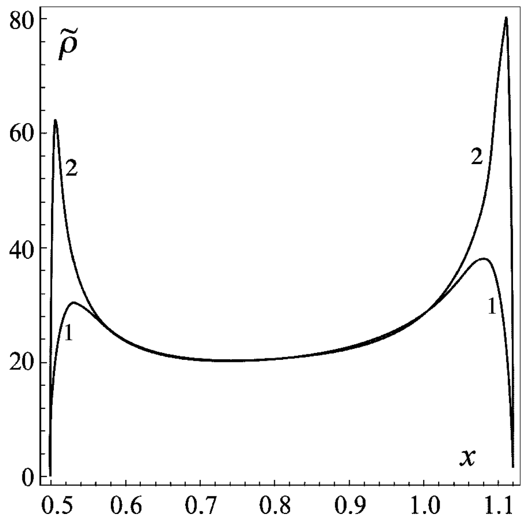

Рис. 1. Безрозмірна густина станів електронів на один вузол $\tilde{\rho} = 2\pi^2 V_1 \rho(E)/N$ як функція безрозмірної енерґії $x = (E-\varepsilon_0)/2V_1$ для різних значень діягонального безладу ($V_1 = V_2, \beta = \langle(\Delta\varepsilon)^2\rangle/4V_1^2$): 1 — $\beta = 0.01$; 2 — $\beta = 0.001$.

[1] Г. Е. Зильберман, Журн. эксп. теор. физ. **32**, 296 (1957).
[2] Г. Е. Зильберман, Журн. эксп. теор. физ. **33**, 387 (1957).
[3] И. М. Лифшиц, М. И. Каганов, Усп. физ. наук **78**, 411 (1962).
[4] Р. Прендж, С. Гирвин, *Квантовый эффект Холла* (Мир, Москва, 1989).
[5] P. G. Harper, Proc. Phys. Soc., London, Sect. A **265**, 317 (1955).
[6] М. Я. Азбель, Журн. эксп. теор. физ. **46**, 929 (1964).
[7] T. Hakobyan, A. Sedrakyan, Preprint, hep–th/9411011 (1994).
[8] M. Takahashi, Y. Hatsugai, M.Kohmoto, preprint cond–mat/9504102 (1995).
[9] A. Kuzmany, H. Spohn, preprint cond–mat/9710282 (1997).
[10] C. Schulze, J. Hajdu, B. Huckenstein, M. Janssen, Preprint, cond–mat/9701056 (1997).
[11] T. Kaneyoshi, Phys. Status Solidi B **118**, 751 (1983).
[12] I. O. Vakarchuk, V. M. Myhal, V. M. Tkachuk, Phys. Status Solidi B **185**, 101 (1994).

ENERGY SPECTRUM AND DENSITY OF STATES OF ELECTRONS WITH DIAGONAL DISORDER ON RECTANGULAR LADDER IN MAGNETIC FIELD

O. M. Woznjak
Precarpathian Vasyl Stefanyk University, Chair of Solid State Physics,
57 Shevchenko Str., Ivano–Frankivsk, UA–284025, Ukraine

The expression for Green's functions of electrons on rectangular ladder with random energy of electrons at sites has been obtained. The energy spectrum and its damping as well as the density of states for this system have been calculated.