PACS NUMBER(S): 71.10+X, 71.20.-B

Вплив магнітного поля на енергетичний спектр і його затухання в невпорядкованій моделі сильного зв'язку

О.М.Возняк, Т.І.Луцишин

Прикарпатський університет імені В. Стефаника, кафедра фізики твердого тіла, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна

Методом функцій Гріна досліджується енергетичний спектр та затухання спектра граткових електронів із випадковим значенням енергії на вузлі в постійному магнітному полі. Одержано аналітичні вирази для системи двох ланцюжків атомів і проведено чисельний аналіз для десятьох ланцюжків.

Ключові слова: енергетичний спектр, затухання спектра, діагональний безлад, магнітне поле.

Стаття поступила в редакцію 28.11.1999; прийнята до друку 11.12.1999

Із часу відкриття квантового ефекту Холла (КЕХ) [1] електронні системи в магнітному полі були об'єктом пильної уваги багатьох дослідників. Роботи, присвячені поведінці густини станів у магнітному полі, підсумовані в [2]. У працях [3,4] розглянуті проблеми локалізації електронних збуджень в невпорядкованих системах, суттєвих для розуміння КЕХ. Проте аналіз процесів в електронних системах у магнітному полі значною мірою грунтується на рівнянні Гарпера для енергії електронів [5], що не враховує наявності безладу в системі.

У нашій роботі досліджується енергетичний спектр сильно зв'язаних електронів з діагональним безладом, а також його затухання.

Вихідним є гамільтоніан [3,6]

$$\widehat{H} = \sum_{n,i} \varepsilon_i^n a_i^+ a_i + \frac{1}{2}\sum_{n,i} e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n} V_1 a_{i+1,n}^+ a_{i,n} + \sum_{n,i} V_2 a_{i,n}^+ a_{i,n+1} + e.c., \qquad (1)$$

який має такий вигляд, якщо магнітне поле напрямлене вздовж одного із кристалографічних напрямів кристала і врахована взаємодія між найближчими сусідами. Тоді поле впливає на електрони лише в площинах перпендикулярних до вибраного напрямку, і система стає квазідвовимірною. Індекси i нумерують вузли в ланцюжках, паралельних до векторного потенціалу поля, а n – ланцюжки, Ф – магнітний потік через елементарну комірку двовимірної гратки, ε_i^n – енергія електрона i-ого вузла n-ого ланцюжка, $V_1(V_2)$ – матричний елемент переходу між вузлами ланцюжка (різних ланцюжків), $a_{i,n}\left(a_{i,n}^+\right)$ – оператор народження (знищення) електрона на і-ому вузлі n-ого ланцюжка, $\Phi_0 = \dfrac{hc}{e}$ – квант магнітного потоку.

Енергетичний спектр і його загасання зручно визначити через функцію Гріна

$$G_{i,j}^{n,m}(E) = \left\langle\left\langle a_{i,n}, a_{j,m}^{+} \right\rangle\right\rangle, \qquad (2)$$

рівняння для якої в енергетичному представленні має вигляд

$$\begin{aligned} EG_{i,j}^{n,m}(E) = \delta_{i,j}\delta_{n,m} + \varepsilon_i^n G_{i,j}^{n,m}(E) + V_1 e^{i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n} G_{i-1,j}^{n,m}(E) + V_1^* e^{-i2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n} G_{i+1,j}^{n,m}(E) \\ + V_2 G_{i,j}^{n+1,m}(E) + V_2^* G_{i,j}^{n-1,m}(E). \end{aligned} \qquad (3)$$

Виділяючи в енергії електрона її середнє значення ε_0 та флуктуації на вузлі $\Delta\varepsilon_i^n$ $(\varepsilon_i^n = \varepsilon_0 + \Delta\varepsilon_i^n)$ і переходячи до k-представлення, одержимо рівняння для функції Гріна:

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

в якому $G_{k,k'}^{n,m}(E)$ і $\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n$ – фур'є-компоненти функції Гріна та флуктуації енергії на вузлі. Рівняння (4) визначають функцію Гріна n-ого ланцюжка через функції Гріна (n-1)-ого і (n+1)-ого ланцюжків та флуктуації вузлової енергії електрона.

Оскільки енергія електрона на вузлі є величиною випадковою, а в експериментах вимірюють усереднені характеристики, з метою одержання усередненої за флуктуаціями функції Гріна, здійснимо конфігураційне усереднення рівняння (4). Тоді

$$\begin{aligned} \left(E - \varepsilon_0 - 2V_1\cos(k - 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n)\right) \overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)} = \delta_{k,k'}\delta_{n,m} + V_2 \overline{G_{k,k'}^{n+1,m}(E)} + \\ + V_2^* \overline{G_{k,k'}^{n-1,m}(E)} + \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k^*}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n G_{k,k'}^{n,m}(E)}. \end{aligned} \qquad (5)$$

Система (5) є системою рівнянь, що зачіпляються, оскільки для знаходження функції Гріна $\overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}$ треба розв'язати рівняння для функцій $\overline{G_{k,k'}^{n-1,m}(E)}$ і $\overline{G_{k,k'}^{n+1,m}(E)}$, які в свою чергу містять функції Гріна $\overline{G_{k,k'}^{n-2,m}(E)}$ і $\overline{G_{k,k'}^{n+2,m}(E)}$ і т.д. Крім того, рівняння (5) містять конструкції $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n G_{k,k'}^{n,m}(E)}$, для яких слід також записати рівняння, які одержують помноживши рівняння (4) на $\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n$, поділивши на величину

$$E - \varepsilon_0 - 2V_1 \cos(k - 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n)$$

і здійснивши конфігураційне усереднення.

Використавши наближення, в якому враховується вклад лише від найближчих сусідів, а для квадратичних за флуктуаціями доданків розщеплення [7,8]

$$\frac{1}{N}\sum_{k_1}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n \Delta\varepsilon_{k^*-k_1}^n G_{k_1,k'}^{n,m}(E)} \approx \frac{1}{N}\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n \Delta\varepsilon_{k^*-k}^n} \cdot \overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}, \qquad (6)$$

одержимо замкнуту систему рівнянь для функцій $\overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}$

$$\overline{G_{k,k'}^{n,m}(E)}\left(E-\varepsilon_0-2V_1\cos(k-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n)-\sum\nolimits_k^{(n)}(E)\right)-V_2\overline{G_{k,k'}^{n+1,m}(E)}- \\ -V_2^*\overline{G_{k,k'}^{n-1,m}(E)}=\delta_{k,k'}\delta_{n,m}, \tag{7}$$

де

$$\sum\nolimits_k^{(n)}(E)=\frac{1}{N}\times \\ \sum_{k^*}\frac{\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}}{\left(E'-2V_1\cos(k^*-\alpha\ n)\right)-\dfrac{|V_2|^2}{E'-2V_1\cos\left(k^*-\alpha\ (n+1)\right)}-\dfrac{|V_2|^2}{E'-2V_1\cos\left(k^*-\alpha\ (n-1)\right)}}, \tag{8}$$

$$\alpha=2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0},\quad E'=E-\varepsilon_0.$$

Для спрощення подальших викладок запишемо рівняння (7) в матричній формі

$$\widehat{G}\left(\widehat{E}+\widehat{V}-\widehat{\Sigma}\right)=\widehat{1}\,\delta_{k,k'}\delta_{m,n}, \tag{9}$$

в якому введено матриці

$$\left(\widehat{G}\right)_{k,k'}^{n,m}=G_{k,k'}^{n,m}(E),\ \widehat{E}=\left(E-\varepsilon_0\right)\widehat{1},$$

$$\left(\widehat{V}\right)_{k,k'}^{n,m}=\left(2V_1\cos\left(k-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}n\right)\delta_{n,m}+V_2\delta_{n+1,m}+V^*{}_2\delta_{n-1,m}\right)\delta_{k,k'}$$

$\left(\widehat{\Sigma}\right)_{k,k'}^{n,m}=\sum\nolimits_k^n(E)\,\delta_{n,m}\delta_{k,k'}$, $\widehat{1}$ – одинична матриця.

Полюси функції Гріна визначають енергетичний спектр системи, ріняння для якого має вигляд

$$det\left|\widehat{E}-\widehat{V}-\widehat{\Sigma}\right|=0 \tag{10}$$

Відмітимо, що $\widehat{\Sigma}(E)$, як і у квантовій теорії поля, має зміст масового оператора, і він має на дійсній осі особливості, для виділення яких покладемо $E=E+i\delta$.

Тоді

$$\sum\nolimits_k^{(n)}(E)=\sum\nolimits_k^{(n)}(E)'-i\sum\nolimits_k^{(n)}(E)'', \tag{11}$$

де $\sum\nolimits_k^{(n)}(E)'$ – дійсна частина масового оператора, що визначається виразом (8), в якому інтегрування по k слід розуміти в сенсі головного значення, $\sum\nolimits_k^{(n)}(E)''$ – уявна частина масового оператора, яка дорівнює

$$\Sigma''(E)=\frac{E_{n+1}^2E_{n-1}^2-|V_2|^2\left(E_{n-1}+E_{n+1}\right)}{E_nE_{n+1}+E_nE_{n-1}+E_{n+1}E_{n-1}-2|V_2|^2}\delta\left(E_nE_{n+1}E_{n-1}-|V_2|^2\left(E_{n-1}+E_{n-1}\right)\right), \tag{12}$$

де $E_n=E-\varepsilon_0-2V_1\cos\left(k+2\pi\dfrac{\Phi}{\Phi_0}n\right)$.

Використовуючи (11), запишемо рівняння (10) так:

$$det\left|\widehat{E}-\widehat{V}-\widehat{\Sigma}'+i\widehat{\Sigma}''\right|=0. \tag{13}$$

Розв’язок цього рівняння лежить у комплексній площині

$$E\to E-i\Gamma. \tag{14}$$

Дійсна частина E визначає енергетичний спектр елементарних збуджень, а Γ – його затухання. Вважаючи затухання малим, із (13) одержимо для спектра

$$det\left|\hat{E}-\hat{V}-\hat{\Sigma}'\right|=0\,, \qquad (15)$$

а виділяючи уявну частину з допомогою співвідношення

$$\det\left|\hat{A}+i\varepsilon\hat{B}\right|=\det\left|\hat{A}\right|\left\{1+i\varepsilon Sp\left(\hat{A}^{-1}\hat{B}\right)\right\},\varepsilon << 1$$

знаходимо затухання

$$\Gamma = Sp\left\{\hat{R}\hat{\Sigma}''\right\}/\,Sp\left\{\hat{R}\right\}, \qquad (16)$$

де $\hat{R}$ – транспонована матриця алгебраїчних доповнень до елементів матриці у визначнику формули (13).

Для розрахунку спектра слід обчислити дійсну частину масового оператора. Вважаючи, що флуктуації енергії на вузлі описуються функцією розподілу Гаусса

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

де $\sigma=\left\langle\left(\Delta\varepsilon\right)\right\rangle^2$, знайдемо середні значення величин $\overline{\Delta\varepsilon_{k-k^*}^n\Delta\varepsilon_{k^*-k}^n}$

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

Аналітичні розрахунки для $\Phi/\Phi_0 = 1/2$ і чисельний аналіз для інших значень Φ/Φ_0 показують, що дійсна частина масового оператора в області спектра дорівнює нулю і відмінна від нуля лише поза спектром. Тому рівняння для спектра в цьому наближенні буде таким же, як і в нульовому наближенні

$$det\left|\hat{E}-\hat{V}\right|=0\,. \qquad (17)$$

Для випадку, коли n=1,2, тобто сиситема містить лише два ланцюжки атомів, для спектра можна одержати аналітичний вираз

$$\begin{aligned}E(k)=\varepsilon_0+V_1\left(\cos\left(k-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)+\cos\left(k-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right)\pm\\ \pm\sqrt{V_1^2\left(\cos\left(k-4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)-\cos\left(k-2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)\right)^2+\left|V_2\right|^2}.\end{aligned} \qquad (18)$$

Особливо простий вигляд має вираз для спектра дволанцюжкової системи при $\Phi/\Phi_0 = 1/2$ [9]

$$E(k)=\varepsilon_0\pm\sqrt{V_1^2\,cos(k)^2+\left|V_2\right|^2}\,, \qquad (19)$$

Для системи, що містить більшу кількість ланцюжків рівняння (17) можна розв'язати лише чисельно. На рисунках 1 і 2 представлено результати чисельного аналізу спетра та його затухання для десяти ланцюжків, реалізованого в програмі Mathematica 3.0, з допомогою якої здійснено аналітичні перетворення визначника для одержання рівняння. Знайдено його корені при фіксованому значенні магнітного потоку через елементарну комірку та їх екстремальні значення. Ці дані використано для побудови залежності ширини підзони енергії, як функції магнітного потоку. Для спектра характерне розбиття на підзони, відстань між якими залежить від величини магнітного потоку. При деяких значеннях спостерігається злиття підзон.

Чисельні результати для спектра при $\Phi/\Phi_0 = 1/2$ використані для побудови залежності затухання від квазіхвильового вектора в першій зоні Бріллюена. У дволанцюжковій системі при $\Phi/\Phi_0 = 1/2$ можна одержати аналітичний вираз для уявної частини масового оператора

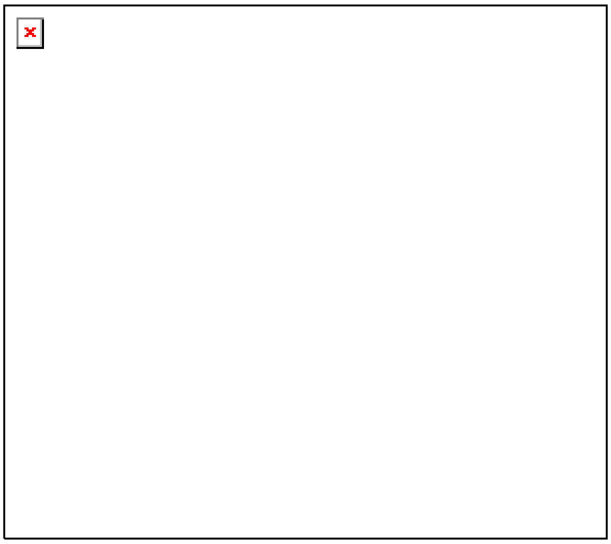

Рис.А. Енергетичні зони десяти ланцюжків атомів у магнітному полі, як функція магнітного потоку через елементарну комірку гратки

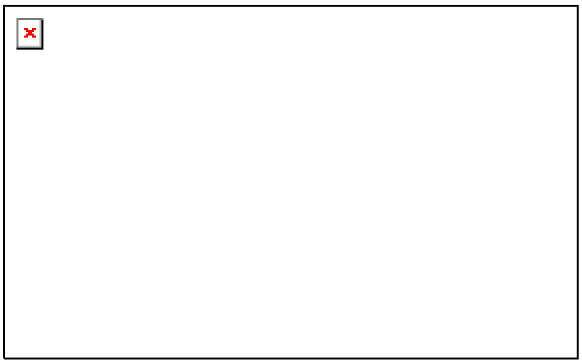

Рис.В. Затухання як функція квазіхвильового вектора при

$$V_1 = V_2 = V,\ \frac{\left\langle (\Delta\varepsilon)^2 \right\rangle}{V} = 0{,}1,\ \Phi/\Phi_0 = 1/2,\ n = 4$$

$$\Sigma_k^{(1)\prime\prime} = \Sigma_k^{(2)\prime\prime} = \frac{\left\langle (\Delta\varepsilon)^2 \right\rangle (E - \varepsilon_0)}{\sqrt{(E-\varepsilon_0)^2 - |V_2|^2}\sqrt{4V_1^2 + |V_2|^2 - (E-\varepsilon_0)^2}} \tag{20}$$

і затухання спектра [9]

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

з якого випливає, що затухання необмежено зростає на границях зон, коли $E = \varepsilon_0 \pm |V_2|$ або $E = \varepsilon_0 \pm \sqrt{4V_1^2 + |V_2|^2}$. Така поведінка затухання свідчить, що електронні збудження на краях зон є недостатньо визначеними.

[1] Р. Прендж С.Гирвин, Квантовый эффект Холла. Мир, М., (1989).
[2] И.В. Кукушкин, С.В. Мешков, В.Б. Тимофеев, Плотность сосотояний двухмерных электронов в поперечном магнитном поле //УФН, 155, 2, с. 219-264(1988).

[3] U. Fastemath, Numerical and analytical investigation of localisation in magnetic filds // J.Phys. Condens Matter, 2, 34, p. 7123-7135 (1990).
[4] Y-L.Lin, F.Nori, Strongly localised electrons in a magnetic fild: Exect rezults on guantum inteference and magnetoconductance// Phys. Rev.Lett., 76, 24, p.4580-4583 (1996).
[5] P.G. Harper, Proc. Phys. Soc., London, Sect., A 265, p. 317 (1955).
[6] M. Tacahashi, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, Conductivity of 2D lattice electrons in a incommensurate magnetic fild// Preprint. Cond– mat 19504102 (1995).
[7] T. Kaneyoshi, On a anomalius behavior of spin-wave stiffness constant in amorpous feromagnets // Phys. Stat. Sol. 196, p.53-67 (1991).
[8] Vakarchuk I.O., Myhal V.M., Tkachuk V.M. Electron-phonon interaction influence on electron an phonon exitations in amorphous metalls// Phys. Stat. Sol. 185, 101, pp.101-115 (1994).
[9] О.М. Возняк, Енергетичний спектр та густина станів електронів з діагональним безладом на прямокутній драбинці в магнітному полі// Журнал фізичних досліджень, 2, 3, с.357-361 (1998).

Influence of magnetic fild on the energy spectrum and its damping in the disodered tight-binding model

O.M. Vaznjak, T.Y. Lutsyshyn
Precarpation Vasyl Stefanyk University, Char of Solid State Physics,
57, Shevchenko str., Ivano-Frankivsk, UA-76000, Ukraine

Green’s function method is used to investigation of the energy spectrum and its damping for the lattice electrons with the random energy at the sites in the constant magnetic field. The analytic expression for the spectrum and its damping for the 2-chains system has been obtained. The numerical analysis for the 10-chains system graphically presented.