Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. В. Фролов, Возмущение поверхностной плотности электронных состояний точечным дефектом – связь с топологией изоэнергетической кривой, *ТМФ*, 1996, том 106, номер 2, 306–314

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1116>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.219.12

26 апреля 2023 г., 13:25:31

С. В. Фролов

ВОЗМУЩЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТОМ – СВЯЗЬ С ТОПОЛОГИЕЙ ИЗОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ КРИВОЙ

Рассматривается дискретное уравнение Шредингера на двумерной решетке Браве, возмущенное точечным потенциалом. Исследована асимптотика возмущения поверхностной плотности состояний. Установлено, что качественное поведение этого возмущения зависит главным образом от топологических свойств изоэнергетической кривой на зоне Бриллюэна.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в связи с развитием техники сканирующей туннельной микроскопии (и спектроскопии) возрос интерес к электронной структуре поверхности проводников. В ряде работ как теоретических (см. [1, 2]), так и экспериментальных (см. [3, 4]) было показано, что электроны на поверхности проводника можно рассматривать как двумерный электронный газ и описывать блоховскими функциями двумерной решетки. Простейшей моделью подобного рода является дискретное двумерное уравнение Шредингера, возникающее в методе кристаллических орбиталей и давно используемое в физике поверхности твердого тела [5]. Эта модель при всей ее простоте и, как следствие, явно решаемости позволяет объяснять достаточно нетривиальные явления типа “суперрешеток” на поверхности графита (см. [6]). Кроме того, у этой модели имеется важное преимущество – она чрезвычайно выпукло показывает влияние геометрии решетки и ее зоны Бриллюэна, а также топологических свойств изоэнергетической кривой, на возмущение локальной плотности поверхностных электронных состояний различными дефектами (типа адсорбированных атомов, дислокаций и пр.).

В настоящей работе рассматривается дискретное уравнение Шредингера на произвольной двумерной решетке Браве (случай других решеток – например, гексагональной – несколько сложнее, но также может быть исследован до конца – см. [6]). Мы получим явное выражение для возмущения локальной плотности состояний точечным потенциалом, а также главный член его асимптотики на больших расстояниях от дефекта. При этом обнаружится, что трем основным топологическим типам изоэнергетической кривой соответствуют три различные картины поведения этого возмущения. Две из них

Рис. 1

(“фриделевские осцилляции” и “суперрешетка”) реально наблюдались в экспериментах (см. [4, 7]), третья же (которую можно условно назвать “темный угол”), насколько известно автору, пока не наблюдалась.

2. НЕВОЗМУЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ

Рассмотрим в $\mathbb{R}^2$ двумерную решетку $\Gamma \equiv \{l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2; (l_1; l_2) \in \mathbb{Z}^2\}$, где $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$ – порождающие векторы. Как известно, эти векторы можно выбрать так, чтобы выполнялись следующие условия (может быть, заменив исходную решетку на ее зеркальное отражение): $a_1 \leq a_2$; $0 \leq \cos \varphi \leq a_1/2a_2$, где φ – угол между $\mathbf{a}_1$ и $\mathbf{a}_2$. Направим ось Ox_1 вдоль вектора $\mathbf{a}_1$. Узловой вектор нашей решетки есть $\mathbf{r}_1 = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 = (l_1 a_1 + l_2 a_2 \cos \varphi; l_2 a_2 \sin \varphi)$. Площадь элементарной ячейки $S = a_1 a_2 \sin \varphi$. Зона Бриллюэна B нашей решетки центрально-симметрична и изображена на рис. 1. Координаты вершин шестиугольника следующие:

$$A_{1;2} : \left(\pi \frac{a_2 - a_1 \cos \varphi}{a_1 a_2 \sin^2 \varphi}; \pm \frac{\pi}{a_2 \sin \varphi} \right);$$

$$B_1 : \left(\pi \frac{a_1 \cos \varphi - a_2 \cos 2\varphi}{a_1 a_2 \sin^2 \varphi}; \pi \frac{a_1 - 2a_2 \cos \varphi}{a_1 a_2 \sin \varphi} \right).$$

Координаты остальных вершин находятся по симметрии. Точки $D_{1;2}$; $C_{1;2}$; $E_{1;2}$ суть середины соответствующих сторон. Группы симметрии решетки (а, следовательно, и зоны Бриллюэна) такие:

	$0 < \cos \varphi < a_1/2a_2$	$\cos \varphi = 0$	$\cos \varphi = a_1/2a_2$
$a_1 < a_2$	C_2	D_2	D_2
$a_1 = a_2$	D_2	D_4	D_6

Противоположные стороны зоны Бриллюэна должны быть отождествлены, т.е. топологически B – тор. При этом все точки, обозначенные на рис. 1 одинаковыми буквами,

сольются в одну (т.е. точки A_1 ; A_2 ; A_3 сольются в одну точку A и т.д.). Площадь зоны Бриллюэна

$$|B| = \frac{4\pi^2}{S} = \frac{4\pi^2}{a_1 a_2 \sin \varphi}.$$

Пусть $\psi_{(l_1; l_2)}$ — функция на нашей решетке. Запишем для нее безразмерное уравнение Шредингера ($\hbar = 1$; $m = 1/2$):

$$\begin{aligned} -\Delta\psi \equiv & -\frac{1}{\sin^2 \varphi} \left(\frac{1}{a_1^2} - \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2} \right) \{ \psi_{(l_1+1; l_2)} + \psi_{(l_1-1; l_2)} - 2\psi_{(l_1; l_2)} \} - \\ & - \frac{1}{\sin^2 \varphi} \left(\frac{1}{a_2^2} - \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2} \right) \{ \psi_{(l_1; l_2+1)} + \psi_{(l_1; l_2-1)} - 2\psi_{(l_1; l_2)} \} - \\ & - \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2 \sin^2 \varphi} \{ \psi_{(l_1-1; l_2+1)} + \psi_{(l_1+1; l_2-1)} - 2\psi_{(l_1; l_2)} \} = \\ & = E\psi_{(l_1; l_2)}, \end{aligned} \quad (1)$$

здесь E — собственное значение непрерывного спектра (энергия). То, что (1) действительно представляет собой дискретное уравнение Шредингера на решетке, легко проверяется: совершив предельный переход в левой части (1) $a_{1,2} \rightarrow 0$ при неизменных a_1/a_2 и φ , получим $-\Delta\psi$.

Рис. 2

Решение уравнения (1) ищем в виде блоховских волн:

$$\psi_1(\mathbf{p}) = \exp\{i\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle\}, \quad \mathbf{p} \equiv (p_1; p_2) \in B. \quad (2)$$

Здесь $\mathbf{p}$ – квазиимпульс, принадлежащий зоне Бриллюэна. Подставляя (2) в (1), получаем дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned} E = E(\mathbf{p}) \equiv & \frac{2}{\sin^2 \varphi} \left\{ \left(\frac{1}{a_1^2} - \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2} \right) [1 - \cos(p_1 \cdot a_1)] + \right. \\ & + \left(\frac{1}{a_2^2} - \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2} \right) [1 - \cos(p_1 a_2 \cos \varphi + p_2 a_2 \sin \varphi)] + \\ & \left. + \frac{\cos \varphi}{a_1 a_2} [1 - \cos(p_1 a_2 \cos \varphi + p_2 a_2 \sin \varphi - p_1 a_1)] \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

Ищем критические точки из системы уравнений

$$\frac{\partial E}{\partial p_1}(p_1; p_2) = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial p_2}(p_1; p_2) = 0. \quad (4)$$

Подставив (3) в (4) и решив получившуюся систему, найдем, что все критические точки, принадлежащие зоне Бриллюэна, следующие: 0 ; C ; $\mathcal{E}$; $\mathcal{D}$; A ; B ; причем A и B – максимумы, 0 – минимум, C ; $\mathcal{E}$ и $\mathcal{D}$ – седла. Соответствующие энергии такие:

$$\begin{aligned} E_0 = 0, \quad E_C = \frac{4}{a_2^2 \sin^2 \varphi}, \quad E_{\mathcal{E}} = \frac{4}{a_1^2 \sin^2 \varphi}, \\ E_{\mathcal{D}} = \frac{4}{a_1^2 a_2^2 \cdot \sin^2 \varphi} (a_1^2 + a_2^2 - 2a_1 a_2 \cdot \cos \varphi), \\ E_A = E_B, \quad E_0 < E_C \leq E_{\mathcal{E}} \leq E_{\mathcal{D}} \leq E_A = E_B. \end{aligned}$$

Выражение для $E_A = E_B$ довольно громоздко, и мы его не выписываем. Таким образом, спектр уравнения (1) абсолютно непрерывен и состоит из одной зоны $[0; E_A]$. Строение изоэнергетической кривой при различных значениях E показано на рис. 2 (верхняя строка такая, как это выглядит на зоне Бриллюэна, нижняя – топологическая схема). Когда энергия пробегает зону спектра, изоэнергетическая кривая претерпевает три морсовские перестройки (при $E = E_C$; $E_{\mathcal{E}}$; $E_{\mathcal{D}}$). Топологический тип ее на зоне Бриллюэна меняется следующим образом:

- 1) $0 < E < E_C$ – гомологичная нулю замкнутая кривая;
- 2) $E_C < E < E_{\mathcal{E}}$ – две замкнутые кривые, каждая из которых по отдельности не гомологична нулю;
- 3) $E_{\mathcal{E}} < E < E_{\mathcal{D}}$ – снова гомологичная нулю замкнутая кривая;
- 4) $E_{\mathcal{D}} < E < E_A$ – две замкнутые кривые, каждая из которых гомологична нулю на зоне Бриллюэна.

Дополнительные симметрии решетки приводят к исчезновению некоторых типов изоэнергетической кривой. Именно, при $a_1 = a_2$ пропадает тип 2, т.к. $E_{\mathcal{E}} = E_C$; при $\varphi = \pi/2$ – тип 4, т.к. $E_{\mathcal{D}} = E_A$; при $\cos \varphi = a_1/2a_2$ – тип 3, т.к. $E_{\mathcal{D}} = E_{\mathcal{E}}$.

Локальная плотность состояний с фиксированной энергией задается формулой (см. [1, 2, 8])

$$\begin{aligned}\rho_{\mathbf{l}}(E) &= \iint_B |\psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})|^2 \delta(E - E(\mathbf{p})) dp_1 \wedge dp_2 = \\ &= \int_{E=E(\mathbf{p})} |\psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})|^2 \omega_E(\mathbf{p}) = \int_{E=E(\mathbf{p})} |\psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})|^2 \frac{ds}{|\operatorname{grad} E(\mathbf{p})|},\end{aligned}\quad (5)$$

где $\delta(E - E(\mathbf{p}))$ — дельта-функция, $\omega_E(\mathbf{p})$ — дифференциальная форма Лере–Гельфанда (т.е. такая форма, что $dE(\mathbf{p}) \wedge \omega_E(\mathbf{p}) = dp_1 \wedge dp_2$ — см. [9]), ds — дифференциал длины изоэнергетической кривой. В невозмущенном случае из (2) имеем $|\psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})|^2 = 1$ и $\rho_{\mathbf{l}}(E)$, очевидно, не зависит от $\mathbf{l}$: $\rho_{\mathbf{l}}(E) = \rho(E)$. Функция $\rho(E)$ имеет логарифмические особенности в точках E_C ; E_E ; E_D , отвечающих седлам $E(\mathbf{p})$ (так называемые сингулярности Ван-Хова [8]).

3. ВОЗМУЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ

Выделим произвольное конечное подмножество точек $X \subset \mathbb{Z}^2$ и возмутим уравнение (1) в точках $\mathbf{l}$, $\mathbf{l} \in X$, потенциалами $u_{\mathbf{l}}$:

$$-\Delta \psi_{\mathbf{l}}^* = \begin{cases} E \psi_{\mathbf{l}}^*, & \mathbf{l} \notin X, \\ (E - u_{\mathbf{l}}) \psi_{\mathbf{l}}^*, & \mathbf{l} \in X, \end{cases}\quad (6)$$

здесь $\psi_{\mathbf{l}}^*$ — собственные функции возмущенного уравнения. Для решения (6) используем следующий абзац:

$$\psi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{p}) = \exp\{i\langle \mathbf{r}_{\mathbf{l}}; \mathbf{p} \rangle\} + \sum_{\mathbf{k} \in X} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \cdot R_{\mathbf{l}-\mathbf{k}}(E(\mathbf{p})),\quad (7)$$

где мы обозначили

$$R_{\mathbf{l}}(E) = \text{v. p.} \iint_B \frac{\exp\{i\langle \mathbf{r}_{\mathbf{l}}; \mathbf{p} \rangle\}}{E(\mathbf{p}) - E} dp_1 \wedge dp_2.$$

Вычислим действие оператора $-\Delta - E$ на функцию (7):

$$\begin{aligned}-\Delta \psi_{\mathbf{l}}^* - E \psi_{\mathbf{l}}^* &= \sum_{\mathbf{k} \in X} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \iint_B (E(\mathbf{p}) - E) \frac{\exp\{i\langle \mathbf{r}_{\mathbf{l}}; \mathbf{p} \rangle\}}{E(\mathbf{p}) - E} dp_1 \wedge dp_2 = \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in X} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \cdot |B| \cdot \delta_{\mathbf{l}; \mathbf{k}} = \begin{cases} |B| \cdot f_{\mathbf{l}}(\mathbf{p}), & \mathbf{l} \in X, \\ 0, & \mathbf{l} \notin X. \end{cases}\end{aligned}\quad (8)$$

Подставляя (8) в (6), получаем, что уравнение (6) при $\mathbf{l} \notin X$ удовлетворяется автоматически, а при $\mathbf{l} \in X$ дает нам систему линейных уравнений на функции $f_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})$:

$$|B| \cdot f_{\mathbf{l}}(\mathbf{p}) = -u_{\mathbf{l}} \left\{ \exp\{i\langle \mathbf{r}_{\mathbf{l}}; \mathbf{p} \rangle\} + \sum_{\mathbf{k} \in X} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) \cdot R_{\mathbf{l}-\mathbf{k}}(E(\mathbf{p})) \right\}.\quad (9)$$

Можно переписать (9) в матричном виде $M\mathbf{f} = \mathbf{e}$, где $\mathbf{f}$ – вектор, составленный из $f_1(\mathbf{p})$; $\mathbf{e}$ – из $\exp\{i\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle\}$; M – матрица с коэффициентами

$$M_{\mathbf{l};\mathbf{k}} = -R_{\mathbf{l}-\mathbf{k}}(E) - \frac{|B|}{u_1} \cdot \delta_{\mathbf{l};\mathbf{k}},$$

M представляет собой эрмитову теплицеву матрицу (т.е. $M_{\mathbf{l};\mathbf{k}}$ зависит только от $\mathbf{l} - \mathbf{k}$) с элементами, зависящими только от энергии E (но не от квазиимпульса $\mathbf{p}$). Если $\det M \neq 0$, то система (9) однозначно разрешима, и решение уравнения (6) дается формулой (7). Если же $\det M = 0$ (это уравнение на E , имеющее некоторое конечное число решений E_i , $i = 1; \dots; N$), то необходимо найти нетривиальное решение соответствующей однородной системы $M\mathbf{f} = \mathbf{0}$, и тогда решение уравнения (6) будет задаваться формулой

$$\psi_{\mathbf{l}}^*(E_i) = \sum_{\mathbf{k} \in X} f_{\mathbf{k}}(E_i) \cdot R_{\mathbf{l}-\mathbf{k}}(E_i). \quad (10)$$

Если E_i не принадлежит зоне спектра, то (10) представляет собой связанное состояние; если же E_i принадлежит зоне, то (10) представляет собой квазисвязанное (виртуальное) состояние (т.е. (10) убывает при $\mathbf{l} \rightarrow \infty$, но не входит в $l_2(\Gamma)$) – см. [10].

В настоящей работе мы подробно рассмотрим только простейший случай одноточечного возмущения $X = \{(0; 0)\}$. Тогда (7) примет вид

$$\psi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{p}) = \exp\{i\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle\} - \frac{u_0}{|B| + u_0 \cdot R_0(E)} R_1(E). \quad (11)$$

С настоящего момента мы будем предполагать, что энергия E принадлежит зоне спектра, не является решением уравнения $\det M = 0$ (т.е. в нашем одноточечном случае $|B| + u_0 \cdot R_0(E) \neq 0$) и не является точкой сингулярности Ван-Хова (т.е. $E \neq 0$; E_C ; E_D ; E_E ; E_A).

Возмущение плотности состояний есть

$$\begin{aligned} \delta\rho_1 &= \int_{E(\mathbf{p})=E} \{|\psi_{\mathbf{l}}^*(\mathbf{p})|^2 - |\psi_{\mathbf{l}}(\mathbf{p})|^2\} \omega_E(\mathbf{p}) = \\ &= -\frac{2u_0}{|B| + u_0 \cdot R_0(E)} \operatorname{Re} \left\{ R_1(E) \cdot \int_{E(\mathbf{p})=E} \exp\{-i\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle\} \omega_E(\mathbf{p}) \right\} + \\ &+ \frac{u_0^2}{(|B| + u_0 \cdot R_0(E))^2} |R_1(E)|^2 \cdot \rho(E), \end{aligned} \quad (12)$$

где $\rho(E)$ – невозмущенная плотность состояний (5).

4. АСИМПТОТИКА ВОЗМУЩЕНИЯ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Нашей основной задачей будет построение главного члена асимптотики (12) при $\mathbf{l} \rightarrow \infty$ и выяснение влияния топологии изоэнергетической кривой на его поведение. Для этого нам необходимо построить асимптотики двух интегралов из (12): интеграла

$$\Phi(E; \mathbf{l}) = \int_{E(\mathbf{p})=E} \exp\{i\langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle\} \omega_E(\mathbf{p})$$

и интеграла $R_1(E)$. Асимптотические свойства таких интегралов хорошо изучены для случая, когда все функции заданы на плоскости (у нас все происходит на торе B). Они определяются так называемыми стационарными точками $\mathbf{p}^j(E)$, в которых вектор $\text{grad}_{\mathbf{p}} \langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p} \rangle = \mathbf{r}_1$ параллелен нормали к изоэнергетической кривой:

$$\Phi(E; \mathbf{l}) \sim \sum_j \Phi_j(E; \mathbf{l}).$$

Вклад $\Phi_j(E; \mathbf{l})$ от каждой такой стационарной точки в главном члене асимптотики имеет вид [11]

$$\begin{aligned} \Phi_j(E; \mathbf{l}) = (2\pi)^{-1/2} \exp \left\{ i \langle \mathbf{r}_1; \mathbf{p}^j \rangle + \frac{\pi i}{4} \cdot \text{sign } K(\mathbf{p}^j) \right\} \times \\ \times |K(\mathbf{p}^j)|^{-1/2} \cdot |\mathbf{r}_1|^{-1/2} \cdot |\text{grad}_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}^j)|^{-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} K(\mathbf{p}) = - \left\{ \left(\frac{\partial E}{\partial p_2} \right)^2 \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial p_1^2} + \left(\frac{\partial E}{\partial p_1} \right)^2 \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial p_2^2} - 2 \frac{\partial E}{\partial p_1} \cdot \frac{\partial E}{\partial p_2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial p_1 \partial p_2} \right\} \times \\ \times \left\{ \left(\frac{\partial E}{\partial p_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial E}{\partial p_2} \right)^2 \right\}^{-3/2} \end{aligned}$$

— кривизна изоэнергетической кривой. Формула (13) годится только для случая невырожденных стационарных точек, т.е. когда $K(\mathbf{p}^j) \neq 0$.

Для интеграла $R_l(E)$ имеет место следующая асимптотика (см. [11]):

$$R_l(E) \sim \pi i \sum_j \Phi_j(E; \mathbf{l}) \cdot \text{sign} \{ \langle \mathbf{r}_1; \text{grad}_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}^j) \rangle \}.$$

Подставляя эти асимптотики в (12), мы получим искомую асимптотику возмущения плотности состояний. Выясним, как она будет выглядеть для различных типов изоэнергетической кривой.

1-й тип ($0 < E < E_C$). Здесь для любого направления $\mathbf{r}_1$ будет всего одна пара стационарных точек, симметричных относительно начала координат. Видно, что $\Phi_j(E; \mathbf{l})$ для этих двух точек будут различаться лишь знаками в экспоненте. Поэтому асимптотика $\Phi(E; \mathbf{l})$ будет содержать косинусы соответствующего выражения, а асимптотика $R_1(E)$ — синус (т.к. скалярное произведение $\langle \mathbf{r}_1; \text{grad}_{\mathbf{p}} E(\mathbf{p}^j) \rangle$, очевидно, будет различаться знаком в наших двух стационарных точках). В целом поведение $\delta \rho_1$ близко к так называемым фриделевским осцилляциям (см. [10]): сферически-симметричные осцилляции, затухающие с ростом расстояния до дефекта r как r^{-1} (с той разницей, что они будут не совсем сферически-симметричны — изоэнергетическая кривая не является окружностью, хотя для высокосимметричных решеток при малых E она весьма близка к окружности). Подобные осцилляции действительно наблюдаются на поверхности металлов [3, 4]. Тот факт, что теоремы об асимптотиках верны для $\mathbb{R}^2$, а не для тора, в

данном случае не имеет значения — изоэнергетическая кривая гомологична нулю на B ; следовательно, мы можем разрезать наш тор, не затронув кривой, расположить его на плоскости и вставить в интегралы гладкую срезку на зону Бриллюэна.

2-й тип ($E_C < E < E_E$). Видно, что в этом случае будут существовать направления, в которых стационарных точек не будет вообще. Действительно, на изоэнергетической кривой — 4 точки перегиба $(\pm p_1^*; \pm p_2^*)$; $(\pm p_1^{**}; \pm p_2^{**})$, нормали к кривой в которых образуют углы α ; $\alpha + \pi$; $-\beta$; $\pi - \beta$ с осью Op_1 ($0 < \alpha; \beta < \pi/2$). Эти точки и углы легко найти из (3), приравняв нулю кривизну, но мы не будем это здесь выписывать из-за громоздкости формул. Пусть $\mathbf{r}_1$ образует угол γ с осью Op_1 . Тогда если $\gamma \in]\alpha; \pi - \beta[\cup]\alpha + \pi; 2\pi - \beta[$, то стационарных точек не будет. Согласно лемме о локализации [11] интегралы $\Phi(E; \mathbf{l})$ и $R_1(E)$ (а, следовательно, и $\delta\rho_1$) убывают быстрее любой степени $|\mathbf{r}_1|$. Если же $\mathbf{r}_1$ не принадлежит этому “темному углу”, т.е. $\gamma \in]-\beta; \alpha[\cup]\pi - \beta; \pi + \alpha[$, то для любого направления будут существовать 4 стационарные точки (как и в случае типа 4 — см. ниже) и $\delta\rho_1$ будет убывать как $|\mathbf{r}_1|^{-1}$. Отметим, что существование такого “темного угла” является следствием гомологической нетривиальности зоны Бриллюэна B и компонент изоэнергетической кривой на ней. Для гладкой замкнутой кривой в $\mathbb{R}^2$ такая ситуация невозможна, для любого направления существуют минимум 2 стационарные точки. Насколько известно автору, экспериментально подобный “темный угол” пока не наблюдался.

3-й тип ($E_E < E < E_D$). Топологически он эквивалентен типу 1, однако картина поведения $\delta\rho_1$ несколько отличается от фриделевских осцилляций. На изоэнергетической кривой возникают 4 точки перегиба, следовательно, в некоторых направлениях будут 2 стационарные точки, а в некоторых — 4. Таким образом, опять должен возникнуть угол, внутри которого поведение $\delta\rho_1$ близко к фриделевским осцилляциям, а вне его — к “суперрешетке” (см. ниже тип 4).

4-й тип ($E_D < E < E_A$). Здесь в силу несвязности изоэнергетической кривой — она состоит из 2 выпуклых замкнутых кривых — для каждого направления существуют 4 стационарные точки, разбивающиеся на 2 пары центрально-симметричных друг другу точек. Следовательно, в выражении для асимптотики интегралов $\Phi(E; \mathbf{l})$ и $R_1(E)$ будет стоять комбинация двух косинусов (синусов) и для $\delta\rho_1$ получится двоякопериодическая структура, накладываемая на фриделевские осцилляции. Подобная структура наблюдалась на поверхности графита (см. [7]) и была названа “суперрешеткой”. Действительно, изоэнергетическая кривая для поверхности графита при энергиях, близких уровню Ферми, принадлежит типу 4 по нашей классификации (см. [12]).

Список литературы

- [1] Davis L. C., Everson M. P., Jaklevic R. C., Shen W. // Phys. Rev. B. 1991-1. V. 43. P. 3821–3830.
- [2] Hørmandering G., Pendry G. B. // Phys. Rev. B. 1994-2. V. 71. P. 18607–18620.
- [3] Hasegawa Y., Avouris Ph. // Phys. Rev. B. 1993. V. 71. P. 1071–1074.
- [4] Crommie M. F., Lutz C. P., Eigler D. M. // Nature. 1993. V. 363. P. 524–527.
- [5] Дэвисон С., Левин Дж. Поверхностные (таммовские) состояния. М.: Мир, 1973.
- [6] Фролов С. В. // ТМФ. 1994. Т. 101. №2. С. 272–281.
- [7] Xhie J., Sattler K., Muller U., Venkateswaran N., Raina G. // Phys. Rev. B. 1991. V. 43. P. 8917–8923.

- [8] *Марадудин А., Монтролл Э., Вейсс Дж.* Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М.: Мир, 1965.
- [9] *Гельфанд И. М., Шилев Г. Е.* Обобщенные функции и действия над ними. М.: Физматгиз, 1958.
- [10] *Киттель Ч.* Квантовая теория твердых тел. М.: ИЛ, 1967.
- [11] *Федорюк М. В.* Асимптотика: интегралы и ряды. М.: Наука, 1987.
- [12] *Tomasek D., Louie S. G.* // Phys. Rev. B. 1988-1. V. 37. P. 8327–8336.

Научно-исследовательский
институт физики
Санкт-Петербургского
государственного университета

Поступила в редакцию
6.VI.1995 г.

S. V. Frolov

**THE PERTURBATION OF THE SURFACE DENSITY OF
ELECTRONIC STATES BY POINT DEFECT – THE CONNECTION
WITH THE TOPOLOGY OF THE ISOENERGETIC CURVE**

The discrete Schrodinger equation on two-dimensional Bravais lattice perturbed by a point potential is considered. The asymptotic behavior of the perturbation of the surface density of states is analyzed. It is established that the behavior of this perturbation depends mainly on the topological properties of the isoenergetic curve on the Brillouin zone.