КОЭФФИЦИЕНТ ПРОЗРАЧНОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

И.Х. Жарекешев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Для системы хаотических рассеивателей с δ-образными потенциалами исследовано влияние внешнего электрического поля на коэффициент прохождения электронов. Обсуждается отклонение полевых зависимостей от аналитических соотношений, найденных в коротковолновом пределе. Рассмотрена функция распределения прозрачности одномерной системы в присутствии внешнего электрического поля.

Введение

Квантово-механическую задачу электропроводности твердотельных низкоразмерных систем можно исследовать двумя основными методами.

Первый подход заключается в нахождении собственных значений и собственных функций квантового модельного гамильтониана. При этом гамильтониан задается в координатном пространстве (решеточная дискретизация) или в импульсном пространстве (дискретизация по векторам обратной решетки). В последнем случае волновый вектор является хорошим квантовым числом.

Второй подход основан на поиске коэффициентов рассеяния, сечения расеяния, коэффициентов прохождения плоской электронной волны от неупорядоченной системы.

Фактически задача о рассеянии тесно связана с задачей на собственные значения, так как полюсы комплексной матрицы амплитуды рассеяния совпадают с собственными частотами гамильтониана. Под неупорядоченной системой здесь понимается твердое тело со статическим потенциалом примесных центров, которые разупорядоченно распределены в объеме образца размерности d. С теоретической точки зрения поиск коэффициентов рассеяния электронной волны для систем с размерностью d=3 довольно затруднителен, поэтому в первом прибли-жении ограничиваются рассмотрением низкоразмерных систем с d<3 .

Эволюция под воздействием внешнего электрического поля

В настоящей работе изучается прозрачность (или коэффициент прохождения) одномерной системы неупорядоченных рассеивателей с потенциалами нулевого радиуса, иначе говоря, с δ-образными потенциалами. Ясно что, для движения электронов в одном направлении необходимо приложить разность потенциалов между концами одномерной системы заданной длины L. Этим обеспечивается однородное электрическое поле, характеризуемое напряженностью F.

Ранее в работах [1-3] коэффициент прохождения вычислялся аналитическими методами без присутствия электрического поля. В результате были получены зависимости логарифма коэффициента прозрачности и электропроводности от длины системы, степени разупорядочения и энергии электрона. Кроме того, в работе [4] было проведено сравнение результатов численного моделирования для композиционного и топологического видов хаоса в расположении примесных центров.

Из скэйлинговой гипотезы квантовых неупорядоченных систем [5] следует, что в отсутствии внешнего электрического поля вследствие локализации электронных состояний в одномерной системе коэффициент прохождения экспоненциально убывает с увеличением длины системы L.

$\tilde{T} = e^{-L/\xi}$, где $\tilde{T}$ является среднем геометрическим (типичным) значением коэффициента прохождения по ансамблю неупорядоченных цепочек, а ξ – половина длины локализации волновой функции одноэлектронного состояния.

При наличии внешнего электрического поля изменение прозрачности с длиной системы зависит от вида случайного по-тенциала. Если концентрация статических рассеивателей *n* достаточно мала, то можно считать, что электрон на каждом примесном центре рассеивается независимо от других центров. В этом случае влияние внешнего электрического поля на прозрачность неупорядоченной системы полностью определяется зависи-мостью сечения упругого рассеяния на одном центре R_1-1-T_1 от энергии электрона E, которая является функцией координаты центра x.

Ранее Пригодин [6], рассматривая цепочку δ-образных центров в однородном электрическом поле напряженностью F, получил в приближении потенциала типа белого шума следующее соотношение:

$$-\frac{\xi}{L} < \ln T >= \frac{\ln(1+FL/E)}{FL/E} = \Phi\left(\frac{FL}{E}\right), \quad (1)$$

где заряд электрона равен единице. Известно, что коэффициент прозрачности при прохождении через потенциал

$V(x)=V_1\delta(x)$

равен $T_1=(1+V_1^2/4E)^{-1}$. Тогда формулу (1) можно получить при условии слабости рассеяния, которое для δ-образных центров совпадает с условием применимости борновского приближения

$R_1 \approx (1+V_1^2/4E) \leq 1$.

Важной особенностью цепочки δ-центров является то, что вероятность прохождения зависит от L при сколь угодно длинной цепочке в отличие от потенциалов, у которых R_1 стремится к нулю быстрее, чем E^{-1}. Отметим, что в работах [7-8] также исследовалась зависимость $<lnT>$ от электрического поля. Причем для области слабого рассеяния, которая рассмотрена в них, результаты моделирования хорошо согласуются с соотношением (1).

Здесь представлены результаты численного моделирования задачи о прохождении электрона через одномерную неупорядоченную систему δ-образных потенциалов в присутствии сильного электрического поля. Методика вычисления коэффициента прозрачности была развита в работах Гаспаряна [9-11]. В дальнейшем обсуждаются результаты расчетов, проведенных для различной степени беспорядка в отсутствие и при наличии постоянного электрического поля. И наконец, рассмотрена функция распределения величины T по реализациям случайного потенциала в присутствии внешнего электрического поля.

Полевая зависимость проводимости одномерной неупорядоченной системы

Плоская электронная волна рассеивается на неупорядоченной системе, в которой δ-образные потенциалы с произвольными амплитудами V_j находятся в произвольных точках цепочки x_j, а именно

$$V(x) = \sum_{j=1}^{N} V_j \delta(x - x_j),$$

Кроме того, наложен регулярный потенциал $U(x)=Fx$, определяемый напряженностью внешнего электрического поля (заряд электрона принят за единицу). Функция Грина электрона $G(x,x^1)$, движущегося в суммарном потенциале, удовлетворяет уравнению Шредингера. Квазиимпульс равен

$$k=\sqrt{E+i\varepsilon}\ (\varepsilon \to 0) \text{ и } \hbar=2m_0=1,$$

где m_0 – масса свободного электрона.

Коэффициент прозрачности как функция напряженности электрического поля F равна

$$T(F) = |D_S|^{-2}, \quad (2)$$

где D_S – детерминант матрицы, элементы которой равны

$$D_{jq} = \delta_{jq} + V_j G_0(x_j, x_j) z_{jq}^{1/2}. \quad (3)$$

где z_{jq} – фаза, набираемая электроном при движении в потенциале $U(x)$ между рассеивателями j и q. Она определяется следующим интегралом

$$z_{jq} = G\exp\left[-\int_{\min(j,q)}^{\max(j,q)} \frac{dx}{G_0(x_1x)}\right]_0 = z_{qj}. \qquad (4)$$

Если потенциала нет в случае отсутствия электрического поля $U(x)\equiv 0$, то мы имеем функцию Грина свободного электрона

$G_0(x,x)=i/2k$

и фаза волновой функции электрона выражается просто расстоянием между координатами рассеивателей

$z_{jq}=exp(2ik\ |x_j - x_q|)$.

Детерминант D_S матрицы (3) удовлетворяет определенным рекуррентным соотношениям, приведенным в работе [10]. Отметим, что формула (4) позволяет получить общую зависимость прозрачности

$<ln\ T> = f(F,L,E)$

от напряженности электрического поля, длины цепочки и энергии рассеивающегося на ней электрона при любом вертикальном и горизонтальном беспорядке δ-образных потенциалов. При наличии внешнего поля в формулах (3), (4) в качестве $G_0(x,x)$ будет фигурировать функция Грина электрона, движущегося в электрическом поле.

Существует ряд преимуществ предложенного метода вычислений по сравнению с другими методами. Мы можем рассматривать влияние горизонтального беспорядка на поведение $<ln\ T>$ как при F=0, так и при наличии электрического поля. В последнем случае для однородного поля вместо импульса k в формулах (4), (5) стоит

$\sqrt{E + Fx_j}$). Кроме того, вычисления можно проводить при произвольной величине и координатной зависимости внешнего поля, нужно только знать функцию Грина электрона в этом поле.

Компьютерное моделирование полевого эффекта

Для того, чтобы рассчитать коэффициента прозрачности T мы выбрали систему с вертикальным (композиционным) беспорядком, причем амплитуды δ-образ-ных потенциалов V_j распределены равно-мерно в интервале

$P(V) \cap [-W/2, W/2]$.

Приведенная модель совпадает с неупорядоченной моделью Кроннига-Пенни. Прозрачность каждой цепочки из ансамбля вычислялась при фиксированных значениях энергии E падающего электрона и различной степени беспорядка W хаотического потенциала. Усреднение проводилось по примерно 1000 реализациям случайного электронного потенциала. Длина цепочки с периодом a достигала $N=L/a\approx$10 000 узлов.

Важным следствием полевого эффекта является следующий факт. В присутствии внешнего электрического поля $F>0$ среднее по ансамблю $<ln\ T>$ с ростом L возрастает медленнее, чем при $F=0$, что связано с переходом от экспоненциальной локали-зацией к «степенной» (1).

Поскольку постоянное поле входит в выражение для прозрачности (2) только в комбинации Fx_j/E, то при расчете мы фиксировали величину поля $F=2\cdot10^{-3}$, изменяя только длину системы. Приняты следующие атомные единицы измерения: длина измеряется в боровских радиусах a_B=5.29x10^{-11} м, энергия – в ридбергах R_y=13.6эВ, напряженность электрического поля - в единицах R_y/ea_B=2.57·10^9 В/см.

На рисунке 1 приведены кривые зависимостей отношения $(\xi/L)<lnT>$ от полевого параметра FL/E при постоянной энергии электрона E=5 для различных значений разброса амплитуд хаотического потенциала W. Хорошо видно, что в коротковолновой области $W\leq4$, то есть в области слабого примесного рассеяния ($k/a\geq15$, $k/\xi\ \geq33.5$) величина коэффициента прозрачности $<ln\ T>$ практически совпадает с формулой (1).

Подобный результат был получен в работе [1], где вместо непрерывного линейного потенциала F_x к цепочке прикладывался «ступенчатый» потенциал в виде суммы Θ-функций:

$$U(x) = F\sum_{j=1}^{x} \Theta(x - ja).$$

При дальнейшем увеличении степени беспорядка (W=7) наблюдается постепенное отклонение от зависимости (1), что является следствием выхода из коротковолнового предела. Причем наибольшее расхождение происходит в окрестности $FL/E \approx 1$, что по-видимому, связано с периодичностью в расположении δ-образных примесных центров.

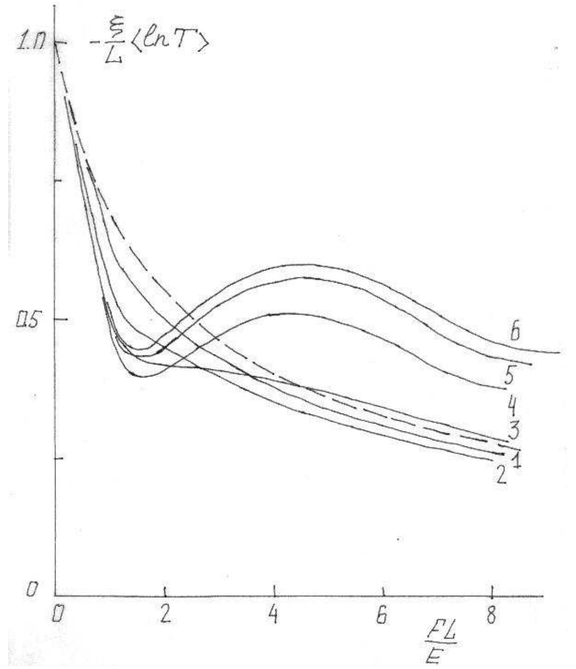

Рис. 1. Зависимость $-(\xi/L)\langle lnT\rangle$ от параметра электрического поля FL/E для энергии E=5 с различной степенью вертикального беспорядка W: 1 - 4, 2 – 7, 3 – 14, 4 – 50, 5 – 80, 6 – 100. Штриховая линия - полевая зависимость в пределе слабого рассеяния (1).

Однако в области больших параметров FL/E>5 асимптотика (1) продолжает выполняться, поскольку электрон на больших расстояниях набирает достаточную энергию, так что kl>1. В условиях сильного примесного рассеяния (W=50), поведение $\langle lnT\rangle$ становится немонотонным и существенно отличается от коротковолнового предела (1)

Для того чтобы найти причину немонотонности, в зависимости коэффициента прозрачности , от электрического поля F в случае вертикального беспорядка, нами был проведен расчет также и для системы с горизонтальным (топологическим) беспорядком в расположении δ-образных центров. В этом случае расстояние между центрами непостоянно и распределено по Пуассоновскому закону, а амплитуды потенциалов всех δ-центров равны постоянной величине V_0>0. Как параметры системы, в задачу входят

а) число рассеивателей N

б) их концентрация n (в отличие от систем с вертикальным беспорядком).

В ансамбле таких цепочек длина системы не является фиксированной, а ее усредненное по ансамблю значение равно $\langle L\rangle = N/n$.

При наличии внешнего постоянного электрического поля коэффициент прозрачности при малых концентрациях вычисляется интегрированием выражения (2) после подстановки в него

$$T_1=[1+V_1^2/4(E+F_x)]^{-1}. \qquad (5)$$

На рисунке 2 приведены зависимости $-(\xi/\langle L\rangle)\langle lnT\rangle$ от $F\langle L\rangle/E$ для горизонтального беспорядка с концентрацией

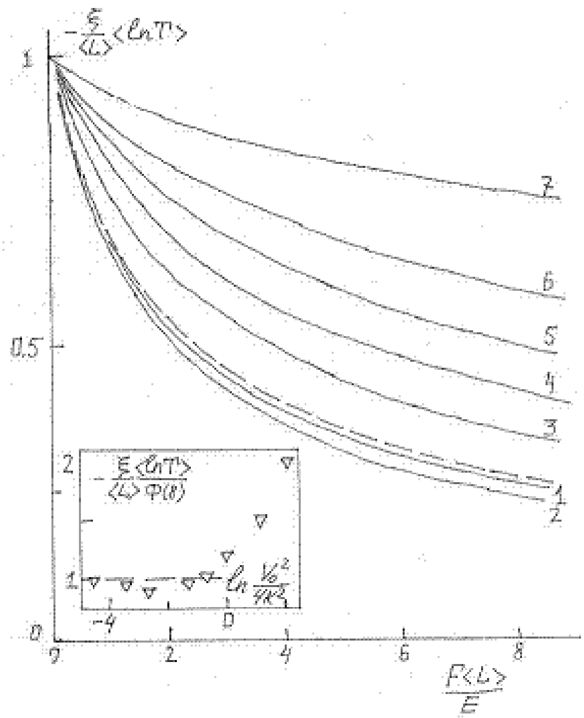

Рис. 2. - Зависимость – $(\xi/\langle L\rangle)\langle lnT\rangle$ от параметра $F\langle L\rangle/E$ для цепочки с топологиче-

ским беспорядком при концентрации n/k=0.45 и энергии E=5 для разных амплитуд потенциала V_0: 1 – 0.2, 2 – 1.2, 3 – 4.4, 4 – 8, 5 – 13, 6 - 20, 7 – 80. Штриховые линии – зависимость (1). На вставке – зависимость отношения ($-\xi/\Phi$ (8)) $<lnT>/<L>$) от параметра беспорядка $V_0^2/4k^2$ для одной точки FL/E=8.

δ-центров n=1.0 и энергией налетающего электрона E=5 при различных значениях параметра беспорядка $V_0/4\,k^2$.

Функция распределения прозрачности

Представляет интерес рассмотреть функцию плотности распределения коэффициента прозрачности одномерной системы δ-образных потенциалов [12]. Известно, что в условиях слабого рассеяния дисперсия логарифма коэффициента прозрачности

$$\sigma^2 = -<(\ln T - <\ln T>)^2>$$

вдвое больше его среднего [9]

$$\sigma^2 = 2<\ln T> = -2L/\xi, \qquad (6)$$

а в области сильного рассеяния их отношение уменьшается с увеличением беспорядка V.

Действительно, из (2-4) легко можно найти, что при $\xi \leq a$ дисперсия для задачи с вертикальным беспорядком амплитуд δ-потенциалов, равномерно распределенных в конечном интервале W, равна σ^2=4N при нулевом поле F=0 и, следовательно

$$\frac{2<\ln T>}{\sigma^2} = \ln\left(\frac{W}{2}\frac{[\sin ka]}{k}\right) - 1, \qquad (7)$$

На рисунке 3 приведены зависимости $2<lnT>/\sigma^2$ в отсутствие внешнего поля F=0 (1) и в присутствии внешнего электрического поля $F=2\cdot10^{-3}$ (2). При $F=0$ хорошо наблюдается переход между асимптотиками (6) и (7). Присутствие электрического поля при сильном рассеянии $\xi \leq a$ отклоняет σ^2 от зависимости (7).

Чтобы протестировать гауссовский вид распределения логарифма вероятности прохождения T исследовалось равенство нулю нечетных, начиная с третьего, центральных моментов и выполнение для четного p-го момента следующего соотношения

$$M_p = <(\ln T - <\ln T>)^F = 1\cdot 3\cdot\ldots\cdot(p-1)\sigma^F \qquad (8)$$

где $p>2$.

На вставке рисунка 3 показаны полевые зависимости таких характеристик функций распределения, как асимметрия j и эксцесс g,

$$f = M_3/\sigma^3, \quad g = M_4/\sigma^4 - 3 \qquad (9)$$

для цепочки с вертикальным беспорядком; W^2=12, $F=2\div10^{-3}$.

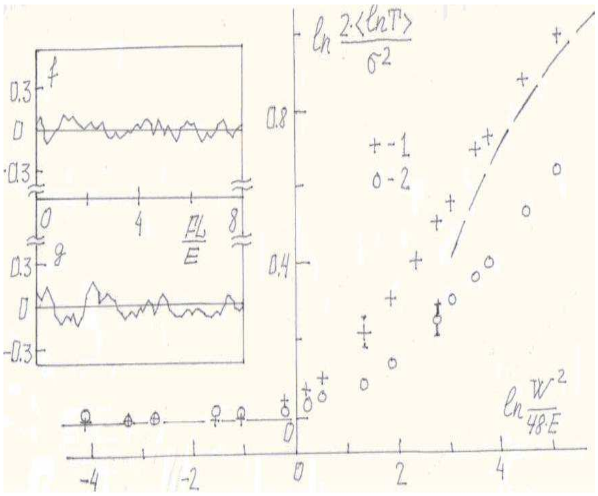

Рис. 3 - Зависимость отношения среднего к дисперсии 2 $<lnT>/\sigma^2$ от параметра $W^2/48E$. Сплошная линия – формула (6), штриховая – формула (7).

В режиме произвольного рассеяния вычисленные значения асимметрии f и эксцесса из (9) сосредоточены, в основном, вокруг нуля, что говорит о сохранении в электрическом поле логарифмически-нормального закона в распределении коэффициента прозрачности в окрестности его типичного значения $\tilde{T}$. Для сравнения эксцесс g равномерного распределения равен –1,2.

Заключение

Для одномерной неупорядоченной системы δ-образных потенциалов с композиционным беспорядком полевая зависимость существенно немонотонна, что, по-видимому, связано с резонансными частотами, которые определяются условием $ka=n\pi$. В случае топологического бесп-орядка в расположунии δ-центров полевой эффект приводит к отклонению от режима слабого рассеяния $\xi \geq a$, когда применимо борновское приближение, при увеличении потенциала V. В присутствии электрического поля прозрачность системы при сильном рассеянии и большой концентрации центров отличается от полевой зависимости, полученной в рамках коротковолнового приближения. Случайная величина прозрачности T неупорядоченной одномерной электронной системы (также как и ее сопротивление [13]) распределена по логарифмически-нормальному закону не только в отсутствие, но и при наличии внешнего поля, вблизи своего типичного значения

Литература: **[1]** *Soukoulis C. M., Jose J. V., Economou E.N., Ping Sheng* // Phys. Rev. Lett. – 1983. – V. 50. N 10, - P. 764 – 767; **[2]** *Gota E., Jose J. V., Azbel M. Ja.* // Phys. Rev. B. – 1985. – V. 31. – N. 10. – P. 6157 – 6165; **[3]** *Bentosela F., Grecchi Y., Zironi F.* // Phys. Rev. B. – 1985. – V. 31. – N. 10. – P. 6909 – 6912; **[4]** *Гаспарян В.М.* ФТТ. - 1989. - Т. 95. – С.162-171; **[5]** *Thouless D. J.* // Phys. Rev. Lett. – 1977. – V. 39. – N 18. – P. 1167-1169; **[6]** *Пригодин В. Н.* // ЖЭТФ. – 1980. – Т. 79. № 6. – С. 2338-2355; **[7]** *Жарекешев И.Х., Гаспарян В.М.* Локальная плотность состояний неупорядоченной цепочки в электрическом поле // Тезисы докладов XIV Всесоюзного совещания по теории полупроводников. – Донецк, 1989. – С.182; **[8]** *V. Gasparian, M. Cahay, E. Jodar* Localization length in a quasi-one-dimensional disordered system in the presence of an electric field // Journal of Physics: Condensed Matter - 2011. – V. 23. – P. 045301-045310; **[9]** *P. Carpena, V. Gasparian, and M. Ortuño,* The electronic spectrum of quantum delta--wells in superlattices in an electric field // Phys. Rev. B. – 1997. – V. 56. –P. 14929-14932; **[10]** *Гаспарян В.М.* // ФТТ. - 1989. - Т. 95. – С.162-171; **[11]** *Gasparian V.M., Altshuler B.L., Aronov A.G., Kasamanian Z.A.* // Phys. Lett. A. – 1988. – V.132. N.4. – P. 201-205; **[12]** *Перель В. И., Поляков Д. Г.* // ЖЭТФ. – 1984. – Т. 86. № 1. – С. 352 – 366; **[13]** *Жарекешев И.Х., Гаспарян В.М.* Сопротивление одномерной неупорядоченной системы в электрическом поле // Тезисы докладов XIV Всесоюзного совещания по теории полупроводников. – Донецк, 1989. – С.114.

Принято в печать 20.11.11

УДК 538.9, 539.21:537.1

КОЭФФИЦИЕНТ ПРОЗРАЧНОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРЫ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Иса Хасенович Жарекешев
Казахский Национальный унивеситет им. Аль-Фараби, г. Алматы
e-mail: **isa2020@mail.ru**, тел. 8 (777) 9707103

Ключевые слова: электронная проводимость, неупорядоченные системы, хаотические флуктуации, низкоразмерные структуры, квантовая локализация

ЖОҒАРЫ ЭЛЕКТР ӨРІСІНДЕГІ РЕТСІЗ ҚҰРЫЛЫМДАРДЫҢ МӨЛДІРЛІГІ

Иса Хасенұлы Жарекешев
Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы
e-mail: isa2020@mail.ru, тел. 8 (777) 9707103

Хаосты системалар үшін δ-тәрізді потнциалымен сыртқы электр өрісінің электрондық өткізілу коэффициенті зерттелді. Өрістер ауытқуы алдын ала табылған қысқатолқындық шегінің талдау қатынастарына тәуелділігі талқыланды. Сыртқы электр өрісінің әсері нәтижесінде бірөлшемді системалар мөлдірлігінің үлестіру функциясы қарастырылды.

TRANSPARENCY COEFFICIENT OF DISORDERED STRUCTURES IN STRONG ELECTRIC FIELD

Isa Kh. Zharekeshev
Al-Farabi Kazakh National Universiiy, Almaty
Email: **isa2020@mail.ru**, Tel. 8 (777) 9707103

For systems of chaotic scatterers with -like potentials the influence of the external electric field on the transparency coefficient of electrons is studied. The discrepancy of field dependences from the analytical solutions derived earlier for the short-length regime is discussed. The distribution function of the transparency of one-dimensional disordered system in the presence of an electric field is considered.