

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ОДНОМЕРНОЙ НАНОСИСТЕМЫ  
С ХАОТИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

И.Х.Жарекешев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби

*Изучены электронные свойства одномерной неупорядоченной системы. Получены зависимости логарифма коэффициента прозрачности и электропроводности от длины системы, степени разупорядочения и энергии электрона. Проведено сравнение результатов численного моделирования для композиционного и топологического видов хаоса в расположении примесных центров.*

**Введение**

Задача квантового туннелирования электрона через низкоразмерные неупорядоченные системы исследовалась как аналитическими методами [1-5], так и численным моделированием [6-8]. Интерес к ней вызван, в частности, тем, что поведение коэффициента прозрачности позволяет проследить за изменением природы одноэлектронных состояний в зависимости от характерных параметров хаотической системы. Для вычисления коэффициента прозрачности конечной неупорядоченной цепочки участок со случайным статистическим электронным потенциалом помещается между двумя полубесконечными почти «идеально» проводящими контактами, в пределах которых электрон движется свободно. Доля электронов, прошедших из одного идеального контакта в другой через «неидеальную» область, и определяет пропускание системы.

Хорошо известно, что вследствие локализации электронных состояний в одномерной системе [1,2] коэффициент прозрачности экспоненциально убывает с увеличением длины цепочки  $L$ . Если рассматривать ансамбль неупорядоченных цепочек, то коэффициент прозрачности  $T$  флуктуирует от образца к образцу.

При этом функции распределения величин  $T$  является логарифмически нормальной [3, 4] вблизи своего среднего геометрического значения.

$$\tilde{T} = e^{(\ln T)} = e^{-L/\xi}, \quad (1)$$

где  $\xi$  – половина длины локализации волновой функции одноэлектронного состояния. В дальнейшем, говоря об усреднении по ансамблю цепочек, обозначаемого угловыми скобками, будем иметь в виду только  $\ln T$ .

**Режимы слабого и сильного рассеяния**

В рамках коротковолнового приближения  $kl \geq 1$  (где  $k$  – импульс электрона, а  $l = (nR_l)^{-1}$  – длина свободного пробега) в работе [4] было показано, что

$$\langle \ln T \rangle = n \int_0^L dx \ln [T_1(x)] \quad (2)$$

Важной особенностью цепочки  $\delta$ -центров является то, что вероятность прохождения зависит от  $L$  при сколь угодно длинной цепочке в отличие от потенциалов, у которых  $R_l$  стремится к нулю быстрее, чем  $E^{-1}$  [4,7]. Известно, что коэффициент прохождения через потенциал  $V(x) = V_l \delta(x)$  равен

$$T_1 = (1 + V_l^2/4E)^{-1}. \quad (3)$$

Представляет интерес вычисление коэффициента прозрачности не только без предположения о слабости рассеяния, но и за пределами коротковолнового приближения, что можно осуществить с помощью численного моделирования. Обычно численный расчет  $T$  проводился методом трансфер – матриц [6-9]. При этом цепочка моделировалась двумя способами в виде  $\delta$ -образных потенциалов разных амплитуд, расположенных периодически (композиционный беспорядок) [6-8], или же одинаковые  $\delta$ -центры находились в случайных точках цепи (топологический беспорядок) [9].

В настоящей работе представлены результаты численного исследования задачи о прохождении электрона через одномерную неупорядоченную систему  $\delta$ -образных потенциалов. В следующем пункте приводится методика вычисления коэффициента прозрачности, развитая в работе [9]. Результаты расчетов проведены для произвольной степени беспорядка.

**Модель проводимости одномерной неупорядоченной системы**

Рассмотрим модель, в которой  $\delta$ -потенциалы с произвольными амплитудами  $V_j$  находятся в произвольных точках цепочки  $x_j$

$$V'(x) = \sum_{j=1}^N V_j \delta(x - x_j), \quad x_j > x_{j-1} \quad (4)$$

Предположим, что имеется регулярный потенциал  $U(x)$  (например, периодический потенциал и т.п.). Запавдывающая функция Грина электрона  $G(x, x')$ , движущегося в суммарном потенциале, удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left[-d^2/dx^2 + U(x) + V(x) + k^2\right]G(x, x') = -\delta(x - x'). \quad (5)$$

где  $k = \sqrt{E + i\varepsilon}$  ( $\varepsilon \rightarrow 0$ );  $\hbar = 2m_0 = 1$ ;  $m_0$  – масса свободного электрона. Как показано в работе [9], функция Грина электрона уравнения (5) связана с затравочной функцией Грина  $G_0(x, x')$  во внешнем потенциале  $U(x)$  соотношением

$$G(x, x') = G_0(x - x') - r_1 \frac{G_0(x, x_1)G_0(x_1, x')}{G_0(x_1, x_1)}, \quad x, x' \leq x_1 \quad (6)$$

где  $G_0(x, x')$  удовлетворяет уравнению

$$\left[-d^2/dx^2 + U(x) + V(x) - k^2\right]G_0(x, x') = -\delta(x - x'), \quad (7)$$

$r_1$  – амплитудный коэффициент отражения. Тогда коэффициент прозрачности цепочки потенциалов (4) записывается в виде.

$$T = 1 - |r_1|^2 = |D_S|^{-2}, \quad (8)$$

где  $D_S$  – детерминант матрицы

$$D_{jq} = \delta_{jq} + V_j G_0(x_j, x_j) z_{jq}^{1/2}. \quad (9)$$

Здесь  $z_{jq}$  – фаза, набираемая электроном при движении в поле  $U(x)$  между рассеивателями  $j$  и  $q$ , равная

$$z_{jq} = G \exp \left[ - \int_{\min(j,q)}^{\max(j,q)} \frac{dx}{G_0(x, x)} \right] = z_{qj}. \quad (10)$$

Если потенциал  $U(x) \equiv 0$ , то  $G_0 = i/2k$  есть функция Грина свободного электрона и мы имеем

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

Детерминант  $D_S$  матрицы (9) удовлетворяет рекуррентному соотношению

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2}, \quad (11)$$

где

$$B_N = z_{N, N-1} \frac{V_N G_0(x_N, x_N)}{V_{N-1} G_0(x_{N+1}, x_{N+1})},$$

$$A_N = 1 + B_N + V_N G_0(x_N, x_N) (1 - z_{N, N-1}), \quad N > 1,$$

$$A_1 = 1 + V_1 G_0(x_1, x_1); \quad D_0 = 1, \quad D_{-1} = 0, \quad (12)$$

Здесь  $D_{N-1(N-2)}$  – определитель, в котором отсутствует  $N$ -й (и  $N-1$ -й) столбец и строка.

Формула (9) с учетом рекуррентных соотношений (11) и (12) позволяет получить зависимость  $\langle \ln T \rangle$  от длины цепочки и энергии налетающего на нее электрона при любом беспорядке  $\delta$ -потенциалов.

Метод расчета коэффициента прохождения, основанный на формулах (8)–(12), имеет, на наш взгляд, некоторые преимущества перед методом, использованным в работах [6-8]. Во-первых, мы можем рассматривать влияние композиционного беспорядка на поведение  $\langle \ln T \rangle$ . Кроме того, предлагаемый способ вычисления  $T$  может быть обобщен, например, на случай потенциалов рассеивателей в виде прямоугольных барьеров.

Для вычисленного коэффициента прозрачности была сначала выбрана цепочка с вертикальным беспорядком, причем амплитуды  $\delta$ -потенциалов  $V_j$  хаотически распределены равномерно в интервале  $[-W/2, W/2]$ . Прозрачность каждой цепочки ансамбля вычислялась по рекуррентным соотношениям (11) и (12) при

различных энергиях  $E$  падающего электрона и степени беспорядка  $W$ . Длина цепочки с периодом  $a$  достигала  $N=L/a \approx 20\,000$  узлов. Усреднение проводилось примерно по 3000 реализациям случайного электронного потенциала.

Из формулы (1) видно, что пропорциональность среднего логарифма  $\langle \ln T \rangle$  длине цепочки  $L$  дает возможность найти длину локализации одномерного электронного состояния  $\xi$ . При условии слабого рассеяния  $R_l \rightarrow 1$  длина локализации равна [6,7]:

$$a/\xi = \langle V_j^2 \rangle / 4E = W^2 / 48E, \quad (13)$$

если энергия не соответствует резонансным точкам  $ka = m\pi$  (амплитуда рассеяния в этом случае незначительна на  $iV_l/2k$ , поэтому особенностей в центре зоны  $ka = m\pi/2$  нет [12]). В другом предельном случае  $\xi \leq a$ , то есть сильного рассеяния в работе [9] было показано, что

$$\frac{a}{\xi} = \left\langle \ln \frac{V_j^2 \sin^2 ka}{E} \right\rangle. \quad (14)$$

Для равномерного распределения амплитуд  $V_j$  легко можно вычислить средний логарифм и, следовательно, радиус локализации из (14)

$$\frac{a}{\xi} = \ln \left[ \frac{W^2 \sin^2 ka}{4E} \right] - 2. \quad (15)$$

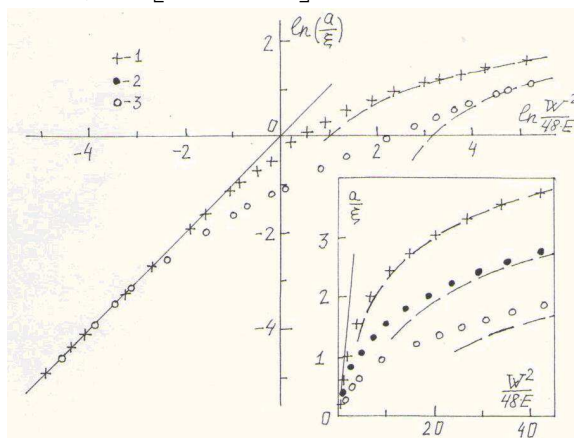


Рис. 1. Зависимость обратного радиуса локализации  $a/\xi = \langle \ln T \rangle / N$  от параметра рассеяния  $W^2/48E$  для задачи с композиционным беспорядком при энергиях электрона  $E=5$ (1), 7.13 (2), 8.21 (3). Сплошная линия – асимптотика слабого рассеяния (13), штриховая линия –

предел сильной локализации (15). Вставка – предел слабого рассеяния (в линейном масштабе).

На рисунке 1 приведена зависимость обратного радиуса локализации  $a/\xi = \langle \ln T \rangle / N$  от величины  $W^2/48E$  для импульсов в первой зоне  $ka < \pi$ . Видно, что расчетные значения  $a/\xi$  в двух предельных случаях рассеяния хорошо совпадают с асимптотиками (13) и (14).

Отметим, что для энергий первой зоны выход за рамки коротковолнового приближения  $kl = kaR^{-1} \sim R^{-1} \geq 1$  эквивалентен нарушению условия слабости рассеяния. Кроме того, чем ближе энергия к краю зоны, тем больший беспорядок необходим для применимости предела сильного рассеяния (15).

Для удобства приняты атомные единицы измерения: длина измеряется в боровских радиусах  $a_B = 5.29 \times 10^{-11}$  м, энергия – в ридбергах  $R_y = 13.6$  эВ.

### Численное моделирование с топологическим беспорядком

Нами был проведен расчет также и для с топологическим (горизонтальным) беспорядком  $\delta$ -центров. В этом случае амплитуды потенциалов всех  $\delta$ -центров равны постоянной величине  $V_0 > 0$ . Кроме этого, задаются число рассеивателей  $N$  и их концентрация  $n$ .

Расположение центров по координате проводится следующим образом. Первая примесь помещается в начало координат  $x_1 > 0$ . Положение следующей за ней примеси  $x_2 > x_1$  выбирается согласно распределению Пуассона  $P \sim \exp[-n(x_2 - x_1)]$  и т.д. Эта процедура продолжается  $N-1$  раз. В ансамбле таких цепочек длина системы не является фиксированной, а ее среднее значение равно  $\langle L \rangle = N/n$ .

Из рекуррентных соотношений (11), (12) следует, что в отсутствие внешнего потенциала  $U_x = 0$  параметрами задачи с горизонтальным беспорядком являются среднее число примесей на длине волны электрона  $n/k$  и борновское сечение рассеяния одного  $\delta$ -центра  $V_0^2/4k^2$ .

Ранее в работе [4] показано, что в коротковолновом пределе радиус локализации  $\xi$  для такой цепочки определяется соотношением

$$\frac{1}{\xi n} = - \langle \ln T \rangle = \ln(1 + V_0^2 / 4k^2). \quad (16)$$

Ясно, что при малых концентрациях рассеивателей  $n \leq k$  коротковолновое приближение применимо для любого типа рассеяния,  $kl \sim k / (nR_l) \geq 1$  [9]. Если  $n \geq k$ , то выражение (16) справедливо до тех пор, пока рассеяние слабое. При увеличении беспорядка расчетное значение  $(k\xi)^{-1}$  превышает величину  $(k\xi^*)^{-1}$  из формулы (16) (рисунок 2).

Отметим, что из формул (11) и (12) можно найти асимптотическое выражение для обратного радиуса локализации при условии  $V \geq n \geq k$ , причем не зависящее от энергии  $(\xi n)^{-1} \propto \ln(V^2/n^2)$ .

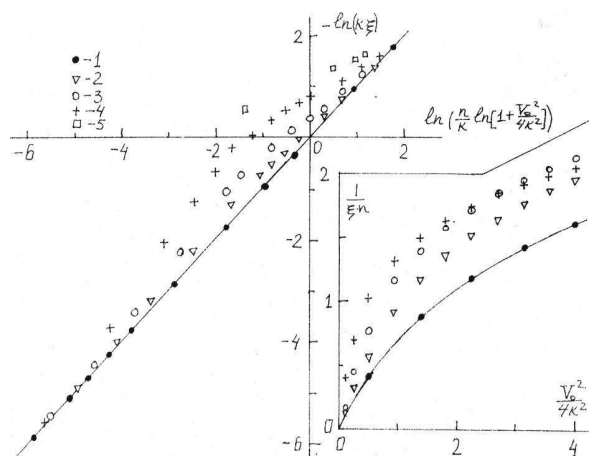


Рис. 2. Зависимость параметра рассеяния  $k \xi$  от его величины в коротковолновом приближении  $k \xi^*$  (формула (16)) для задачи с топологическим беспорядком при различных кон

центрациях  $\delta$ -центров  $n/k$ : 1 – 0,01, 2 – 0,45, 3 – 1, 4 – 2, 5 – 4. На вставке – зависимость обратного радиуса локализации  $(\xi n)^{-1}$  от параметра беспорядка  $V^2/4k^2$ . Сплошная линия – коротковолновый предел (16).

Видно, что отклонение от перехода слабого рассеяния (3) растет с увеличением беспорядка. Поскольку в этом случае спектр не имеет особых точек, изменение коэффициента прозрачности происходит монотонно в отличие от цепочки с вертикальным беспорядком  $\delta$ -центров.

### Заключение

Итак, для одномерной неупорядоченной системы  $\delta$ -образных потенциалов существует два режима: режим слабого рассеяния  $\xi \geq a$ , когда применимо борновское приближение, и предел сильного рассеяния  $\xi \leq a$ , переход между которыми можно изучать численно наподобие компьютерного анализа для систем с высокой размерностью [10,11]. Вблизи своего среднего значения величина  $\ln T$  распределена по Гауссу. Отметим, что по такому же закону распределены времена релаксации электронной плотности в одномерном диэлектрике [5], что также связано с нормальным распределением обратных радиусов локализации  $(a/\xi)$ . Кроме того, в эффекте Кондо существует неисчезающая доля свободных моментов в режиме слабого рассеяния [12]. По-видимому, имеется прямое соотношение между коэффициентом прозрачности и временем жизни волнового пакета в одномерном неупорядоченном образце конечной длины.

**Литература:** [1] *Mott N. F., Twose W. D.* // *Adv. Phys.* – 1961. – V. 10. – N 38. – P. 107–163. (Пер. с англ.: Mott H., // УФН. 1963. Т. 79. № 4. С. 691 – 740); [2] *Thouless D. J.* // *Phys. Rev. Lett.* – 1977. – V. 39. – N 18. – P. 1167-1169; [3] *Мельников В. И.* // ФТТ. – 1981. – Т. 23. № 3. – С. 782–786; – 1982. Т. 24. № 4. – С. 1055 – 1061; [4] *Перель В. И., Поляков Д. Г.* // ЖЭТФ. – 1984. – Т. 86. № 1. – С. 352 – 366; [5] Пригодин В. Н. // ЖЭТФ. – 1980. – Т. 79. № 6. – С. 2338 2355; [6] *Soukoulis C. M., Jose J. V., Economou E.N., Ping Sheng* // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – V. 50. N 10, - P. 764 – 767; [7] *Gota E., Jose J. V., Azbel M. Ja.* // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 31. – N. 10. – P. 6157 – 6165; [8] *Bentosela F., Grecchi Y., Zironi F.* // *Phys. Rev. B.* – 1985. – V. 31. – N. 10. – P. 6909 – 6912; [9] Гаспарян В.М. ФТТ. - 1989. - Т. 95. – С.162-171; [10] *Zharekeshev I.Kh.,Kramer B.* Advanced diagonalization in models of quantum disordered systems // *Computer Physics Communications.* – 1999. – V.121/122. – P. 502-504; [11] *Zharekeshev I.Kh.,Kramer B.* Parametric motion of energy levels in quantum disordered systems // *Physica A.* – 1999. – Vol.266. – P. 450-455; [12] *Zhuravlev A., Zharekeshev I.Kh., Lichtenstein A.I., Mucciolo E.R., Kettemann S.* Nonperturbative scaling theory of free magnetic moment phases in disordered metals // *Physical Review Letters.* – 2007. – V.99. – P. 247202.1-247202.4.

**Принято в печать 21.12.11**

**УДК 538.9, 539.21:537.1**

#### ХАОСТЫҚ ПОТЕНЦИАЛДЫ БІРӨЛШЕМДІ НАНОЖҮЙЕНІҢ ЭЛЕКТРӨТІМДІЛІГІ

**Иса Хасенович Жарекешев**

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Алматы

Алматы 050012, Қазақстан, Төле-би к-сі 96а

e-mail: isa2020@mail.ru, тел. 8 (777) 9707103, Факс 8 (727) 2927075

Бірөлшемді ретсіз жүйенің электрондық қасиеттері зерттелген. Мөлдірлігінің коэффициентінің және электрөтімділігінің жүйенің ұзындығынан, ретсіз дәрежесінен және электрон энергиясынан тәуелділіктері алынған. Қоспалық центрлерінде орналасқан композициялық және топологиялық хаос түрлеріне арналған сандық модельдеу нәтижелерінің салыстыруы өткізілген.

#### ELECTRONIC CONDUCTIVITY ONE-DIMENSIONAL NANOSYSTEM WITH CHAOTIC POTENTIAL

**Isa Kh. Zharekeshev**

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty

Almaty 050012, Kazakhstan, Tole-bi 96a

Email: isa2020@mail.ru, Tel. 8 (777) 9707103, Fax 8 (727) 2927075

The electron properties of one-dimensional disordered systems are investigated. The dependencies of transparency coefficients and electron conductivity on the system length, disorder degree and the electron energy are obtained. The comparison of results of numerical simulations between the compositional and the topological types of chaos in positions of impurity centers is performed.

**Keywords:** electron conductivity, disordered systems, chaotic fluctuations, low-dimensional structures, quantum localization

#### ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ОДНОМЕРНОЙ НАНОСИСТЕМЫ С ХАОТИЧЕСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ

**Иса Хасенович Жарекешев**

Казахский Национальный университет им. Аль-Фараби, г. Алматы

Алматы 050012, Казахстан, Толе-би 96а

e-mail: isa2020@mail.ru, тел. 8 (777) 9707103, Факс 8 (727) 2927075

Изучены электронные свойства одномерной неупорядоченной системы. Получены зависимости коэффициента прозрачности и электропроводности от длины системы, степени разупорядочения и энергии электрона. Проведено сравнение результатов численного моделирования для композиционного и топологического видов хаоса в расположении примесных центров.

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