

УДК 539.2
 © 1990

ПРОЗРАЧНОСТЬ ОДНОМЕРНОЙ СИСТЕМЫ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ БЕСПОРЯДКОМ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

В. М. Гаспарян, И. Х. Жарекешев

Исследовано влияние внешнего электрического поля на прохождение электрона через цепочку случайных рассеивателей с δ -образными потенциалами. При помощи численного моделирования получены зависимости среднего по ансамблю логарифма коэффициента прозрачности от длины цепочки, степени неупорядоченности, энергии электрона и величины электрического поля. Обсуждается отклонение этих зависимостей от аналитических соотношений, найденных в коротковолновом пределе. Проведено сравнение результатов расчета для «вертикального» и «горизонтального» типов беспорядка в расположении центров рассеяния. Рассмотрено распределение коэффициента прозрачности одномерной системы в присутствии электрического поля.

1. Вопрос о прохождении электрона через одномерную неупорядоченную систему изучался аналитически [1-5] и численно [6-9]. Интерес к нему вызван, в частности, тем, что поведение коэффициента прозрачности позволяет проследить за изменением природы одноэлектронных состояний в зависимости от характерных параметров системы и внешних полей. Для вычисления коэффициента прозрачности конечной цепочки участков со случайным статическим потенциалом помещается между двумя полубесконечными «идеально» проводящими контактами, в которых электрон движется свободно. Доля электронов, прошедших из одного контакта в другой через «неидеальную» область, и определяет пропускание системы.

В отсутствие внешнего электрического поля 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 функция распределения величин T является логарифмически-нормальной [3, 4] вблизи своего среднего геометрического значения

$$\tilde{T} = e^{\langle \ln T \rangle} = e^{-L/\xi}, \tag{1}$$

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

При наличии внешнего электрического поля изменение прозрачности с длиной системы зависит от вида случайного потенциала. Если концентрация рассеивателей n мала, то можно считать, что электрон на каждом центре рассеивается независимо от других центров. В этом случае влияние электрического поля на прозрачность полностью определяется зависимостью сечения упругого рассеяния на одном центре $R_1 = 1 - T_1$ от энергии электрона E , которая является функцией координаты центра x . В рамках коротковолнового приближения $kl \gg 1$ (где k — импульс электрона, $l = (nR_1)^{-1}$ — длина свободного пробега) в работе [4] было показано, что

$$\langle \ln T \rangle = n \int_0^L dx \ln [T_1(x)]. \tag{2}$$

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

$$-\frac{\xi}{L} \langle \ln T \rangle = \frac{\ln(1 + FL/E)}{FL/E} \equiv \Phi\left(\frac{FL}{E}\right), \quad (3)$$

где заряд электрона равен единице. Известно, что коэффициент прохождения через потенциал $V(x) = V_1 \delta(x)$ равен $T_1 = (1 + V_1^2/4E)^{-1}$. Тогда формулу (3) можно получить из (2) при условии слабости рассеяния, которое для δ -центров совпадает с условием применимости борновского приближения $R_1 \simeq V_1^2/4E \ll 1$. 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} [4, 7].

Представляет интерес вычисление коэффициента прозрачности не только без предположения о слабости рассеяния, но и за пределами коротковолнового приближения, что можно сделать с помощью ЭВМ. Обычно численный расчет T проводился методом трансфер-матриц [6-9]. При этом цепочка моделировалась двумя способами: в виде δ -образных потенциалов разных амплитуд, расположенных периодически (вертикальный беспорядок) [6-8], или же одинаковые δ -центры находились в случайных точках цепи (горизонтальный беспорядок) [9]. В работах [6, 7] исследовалась и зависимость $\langle \ln T \rangle$ от электрического поля. Причем для области слабого рассеяния, которая рассмотрена в них, результаты моделирования хорошо согласуются с соотношением (3).

В настоящей работе представлены результаты численного исследования задачи о прохождении электрона через одномерную неупорядоченную систему δ -образных потенциалов. В разделе 2 приводится методика вычисления коэффициента прозрачности, развитая в работах [10, 11]. Результаты расчетов, проведенных для произвольной степени беспорядка в отсутствие и при наличии постоянного электрического поля, обсуждаются в разделе 3. Там же рассмотрена функция распределения величины T по реализации случайного потенциала в присутствии внешнего электрического поля.

2. Рассмотрим модель, в которой δ -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 $U(x)$ (внешнее электрическое поле, периодический потенциал и т. д.). Запаздывающая функция Грина электрона $G(x, x')$, движущегося в суммарном потенциале, удовлетворяет уравнению Шредингера

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

где $k = \sqrt{E + i\epsilon}$ ($\epsilon \rightarrow 0$); $\hbar = 2m_0 = 1$; m_0 — масса свободного электрона. Как показано в работе [11], функция Грина электрона уравнения (5) связана с затравочной функцией Грина $G_0(x, x')$ во внешнем поле $U(x)$ 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

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

r_1 — амплитудный коэффициент отражения. Тогда коэффициент прозрачности цепочки потенциалов (4) записывается в виде [10, 11]

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

где D_N — 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

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

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_N матрицы (9) удовлетворяет рекуррентному соотношению

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

где

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

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

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

$D_{N-1(N-2)}$ — определитель, в котором отсутствует N -й (и $(N-1)$ -й) столбец и строка. Формула (9) с учетом рекуррентных соотношений (11), (12) позволяет получить зависимость $\langle \ln T \rangle$ от длины цепочки и энергии налетающего на нее электрона при любом вертикальном и горизонтальном беспорядке δ -потенциалов. При наличии внешнего поля в формулах (9), (10) в качестве $G_0(x, x)$ будет фигурировать функция Грина электрона, движущегося в электрическом поле.

Метод расчета коэффициента прохождения, основанный на формулах (8)–(12), имеет, на наш взгляд, некоторые преимущества перед методом, использованным в работах [6–9]. Во-первых, мы можем рассматривать влияние горизонтального беспорядка на поведение $\langle \ln T \rangle$ как при $F=0$, так и при наличии поля (для однородного поля вместо импульса k в формулах (9), (10) стоит $\sqrt{E + Fx_j}$). Во-вторых, вычисления можно проводить при произвольной величине и координатной зависимости внешнего поля, нужно только знать функцию Грина электрона в этом поле. Кроме того, предлагаемый способ вычисления T может быть обобщен, например, на случай потенциалов рассеивателей в виде прямоугольных барьеров.

3. Для численного расчета коэффициента прозрачности была сначала выбрана цепочка с вертикальным беспорядком, причем амплитуды δ -потенциалов V_j распределены равномерно в интервале $[-W/2, W/2]$. Прозрачность каждой цепочки ансамбля вычислялась по рекуррентным соотношениям (11), (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 по ~ 3000 реализациям случайного потенциала. Из формулы (1) видно, что пропорциональность $\langle \ln T \rangle$ длине цепочки L дает возможность найти длину локализации ξ . При условии слабого рассеяния $R_1 \rightarrow 1$ 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 $iV_1/2k$, поэтому особенностей в центре зоны $ka = m\pi/2$ нет [12]). В другом предельном случае $\xi \ll a$ сильного рассеяния в работе [10] 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)

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

На рис. 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/ξ в двух предельных случаях рассеяния хорошо совпадают с асимптотиками (13) и (14). Отметим, что для энергий

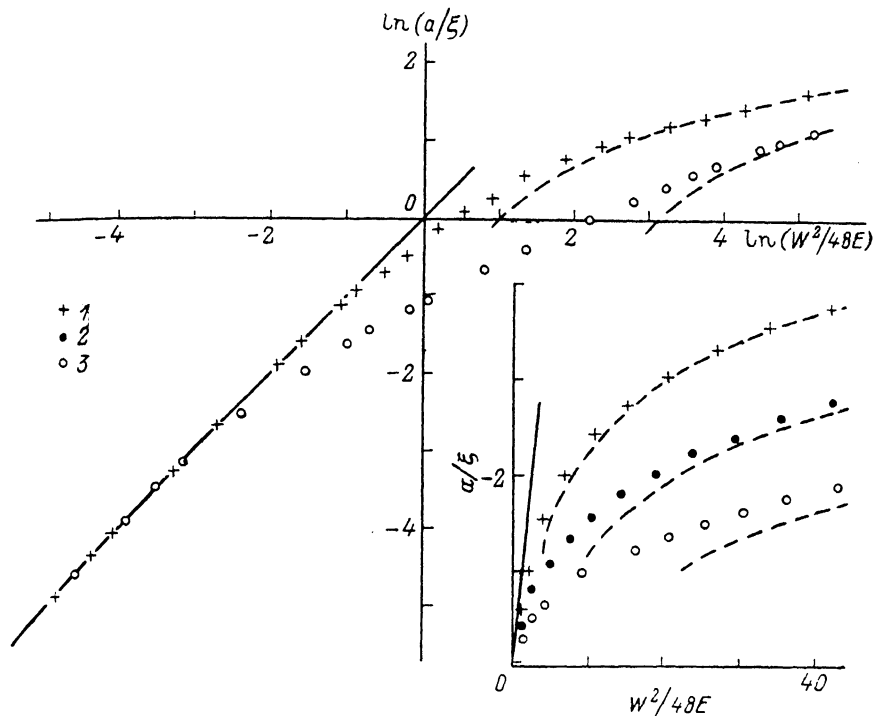


Рис. 1. Зависимость обратного радиуса локализации $a/\xi = \langle \ln T \rangle / N$ от величины $W^2/48E$ для задачи с вертикальным беспорядком при энергиях электрона $E=5$ (1), 7.13 (2), 8.21 (3).

Сплошная линия — асимптотика слабого рассеяния (13), штриховая — предел сильной локализации (15).

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

В присутствии внешнего электрического поля $F > 0$ среднее по ансамблю $\langle \ln T \rangle$ с ростом L возрастает медленнее, чем при $F=0$, что связано с переходом от экспоненциальной локализации к «степенной» (3). Поскольку постоянное поле входит в выражение для прозрачности (8) только в комбинации Fx_j/E , то при расчете мы фиксировали величину поля $F = 2 \cdot 10^{-3}$, изменяя только длину системы. Для удобства приняты атомные единицы измерения: длина измеряется в боровских радиусах $a_B = 5.29 \times 10^{-11}$ м, энергия — в ридбергах $Ry = 13.6$ эВ, напряженность электрического поля — в единицах $Ry/ea_B = 2.57 \cdot 10^9$ В/см.

На рис. 2 приведены кривые зависимостей отношения $(\xi/L)\langle \ln T \rangle$ от параметра FL/E при постоянной энергии $E=5$ для различных значений

разброса амплитуд W . Видно, что в коротковолновой области $W \leq 4$ ($\xi/a \geq 15$, $k\xi \geq 33.5$) величина коэффициента прозрачности $\langle \ln T \rangle$ практически совпадает с формулой (3). Аналогичный результат был получен в работе [6], где вместо линейного потенциала Fx к цепочке прикладывался «ступенчатый» потенциал в виде суммы θ -функций

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

При дальнейшем увеличении степени беспорядка $W=7$, $k\xi \sim 10$ наблюдается постепенное отклонение от зависимости (3), что является следствием выхода из коротковолнового предела. Причем наибольшее расхо-

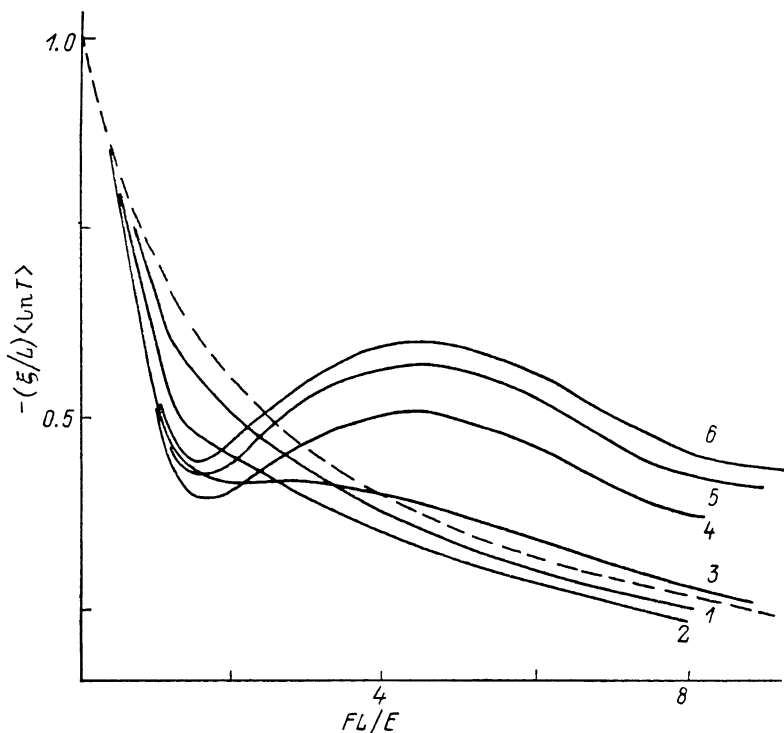


Рис. 2. Зависимость $-(\xi/L)\langle \ln T \rangle$ от параметра электрического поля FL/E для энергии $E=5$ с различной степенью вертикального беспорядка.

W : 1 — 4, 2 — 7, 3 — 14, 4 — 50, 5 — 80, 6 — 100. Штриховая линия — полевая зависимость в пределе слабого рассеяния (3).

жение происходит в окрестности $FL/E \sim 1$, что, по-видимому, связано с периодичностью в расположении примесей. Однако в области больших $FL/E \geq 5$ асимптотика (3) продолжает выполняться, поскольку электрон на большом расстоянии набирает достаточную энергию, так что $kl \gg 1$. В условиях сильного рассеяния $W \geq 50$ ($k\xi \leq 0.2$), когда $\xi \leq a$, поведение $\langle \ln T \rangle$ становится немонотонным и существенно отличается от коротковолнового предела (3).

Для того чтобы найти причину немонотонности в зависимости коэффициента прозрачности от поля в случае вертикального беспорядка, нами был проведен расчет также и для цепочки с горизонтальным беспорядком δ -центров. В этом случае амплитуды потенциалов всех δ -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 $x_1 \geq 0$. 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 поля $U(x) = 0$ параметрами задачи с горизонтальным беспорядком являются среднее число примесей на длине волны электрона n/k и борновское сечение рассеяния одного δ -центра $V_0^2/4k^2$. В работе [4] показано, что в коротковолновом пределе радиус локализации ξ для такой цепочки определяется соотношением

$$1/\xi n = -\langle \ln T \rangle / N = \ln(1 + V_0^2/4k^2) \equiv 1/\xi^* n. \quad (16)$$

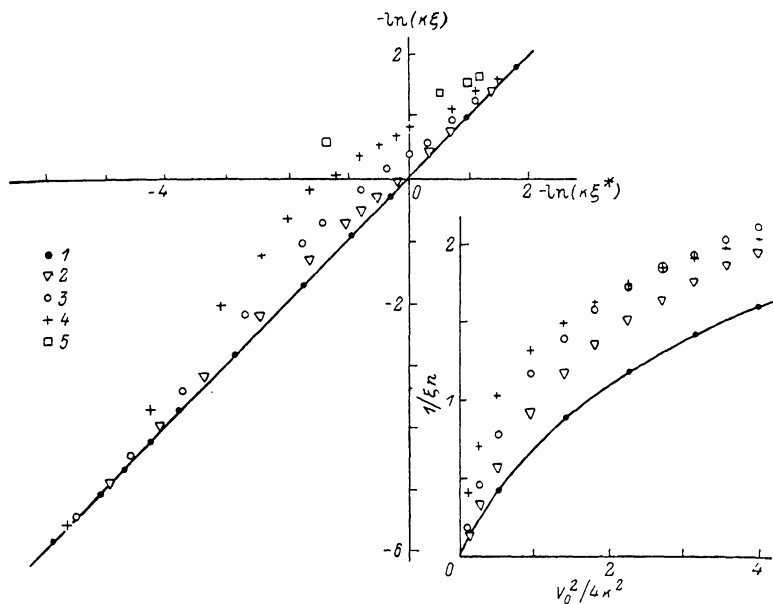


Рис. 3. Зависимость параметра рассеяния $k\xi$ от его величины в коротковолновом приближении $k\xi^*$ (формула (16)) для задачи с горизонтальным беспорядком при различных концентрациях δ -центров.

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).

Ясно, что при малых концентрациях $n \ll k$ коротковолновое приближение применимо для любого рассеяния, $kl \sim k/(nR_1) \gg 1$ [9]. Если $n \gg k$, 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) (рис. 3). Отметим, что из (11), (12) можно найти асимптотическое выражение для обратного радиуса локализации при $V \gg n \gg k$, не зависящее от энергии $(\xi n)^{-1} \sim \ln(V^2/n^2)$.

При наличии внешнего постоянного электрического поля коэффициент прозрачности при малых концентрациях вычисляется интегрированием выражения (2) после подстановки в него $T_1 = [1 + V_0^2/4(E + Fx)]^{-1}$. На рис. 4 приведены зависимости $-(\xi/\langle L \rangle) \langle \ln T \rangle$ от $F\langle L \rangle/E$ для горизонтального беспорядка с концентрацией δ -центров $n=1.0$ и энергией налетающего электрона $E=5$ при различных значениях параметра беспорядка $V_0/4k^2$. Видно, что отклонение от предела 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 δ -центров (рис. 2).

Представляет интерес рассмотреть функцию распределения коэффициента прозрачности одномерной системы δ -образных потенциалов [13]. Известно, что в условиях слабого рассеяния дисперсия σ^2 логарифма коэффициента прозрачности вдвое больше его среднего [3, 9]

$$\sigma^2 = \langle (\ln T - \langle \ln T \rangle)^2 \rangle = -2 \langle \ln T \rangle = 2L/\xi, \quad (17)$$

а в области сильного рассеяния их отношение уменьшается с увеличением беспорядка. Действительно, из (11), (12) легко можно найти, что при $\xi \ll a$ дисперсия для задачи с вертикальным беспорядком амплитуд δ -потенциалов, равномерно распределенных в конечном интервале W , равна $\sigma^2 = 4N$ при $F=0$ и, следовательно,

$$\frac{2 \langle \ln T \rangle}{\sigma^2} = \ln \left(\frac{W}{2} \frac{|\sin ka|}{k} \right) - 1. \quad (18)$$

На рис. 5 приведены зависимости $2 \langle \ln T \rangle / \sigma^2$ в отсутствие внешнего поля (1) и при $F=2 \cdot 10^{-3}$ (2). Для $F=0$ хорошо наблюдается переход

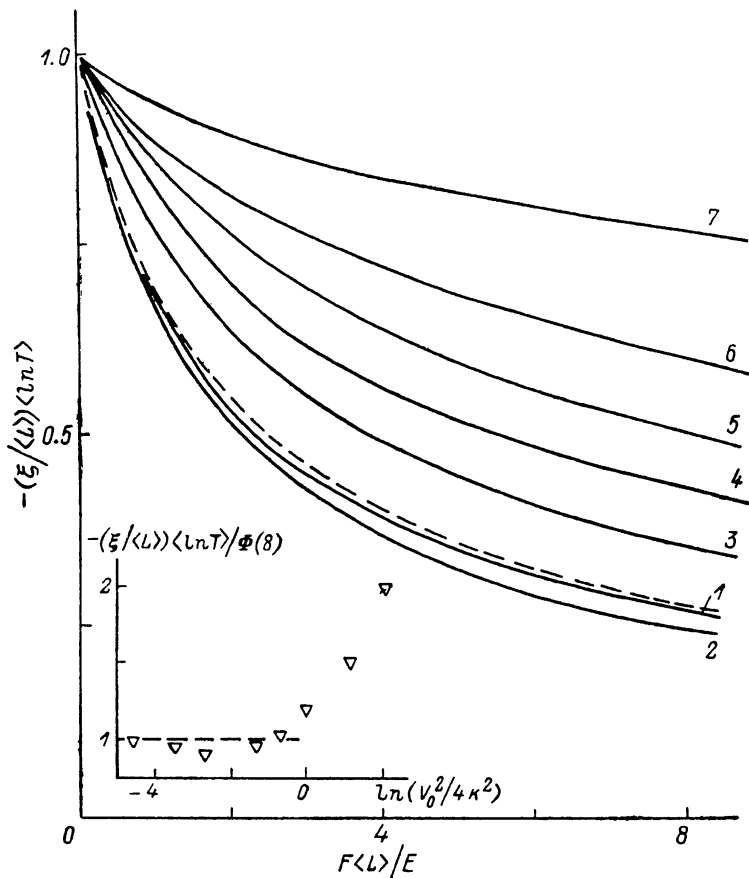


Рис. 4. Зависимость $(-\xi/\langle L \rangle)\langle \ln T \rangle$ от параметра $F\langle L \rangle/E$ для цепочки с горизонтальным беспорядком при концентрации $n/k=0.45$ и энергии $E=5$ для разных амплитуд V_0 : 1 — 0.2, 2 — 1.2, 3 — 4.4, 4 — 8, 5 — 13, 6 — 20, 7 — 80. Штриховые линии — зависимость (3). На вставке — зависимость отношения $(-\xi/\Phi(8))(\langle \ln T \rangle/\langle L \rangle)$ от параметра беспорядка $V_0^2/4k^2$ для одной точки $FL/E=8$.

между асимптотиками (17) и (18). Присутствие электрического поля при сильном рассеянии $\xi \ll a$ отклоняет σ^2 от зависимости (18).

Для проверки гауссовости распределения логарифмов вероятности прохождения T исследовалось равенство нулю нечетных, начиная с третьего, центральных моментов и выполнение для четного p -го момента соотношения

$$M_p = \langle (\ln T - \langle \ln T \rangle)^p \rangle = 1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (p-1) \sigma^p, \quad (19)$$

где $p=2 \div 10$. На рис. 5 (вставка) показаны полевые зависимости таких характеристик функции распределения, как асимметрия f и эксцесс g ,

$$f = M_3/\sigma^3, \quad g = M_4/\sigma^4 - 3 \quad (20)$$

для цепочки с вертикальным беспорядком; $W^2=12$, $F=2 \cdot 10^{-3}$. В режиме произвольного рассеяния вычисленные значения асимметрии f и эксцесса g сосредоточены в основном вокруг нуля, что говорит о сохранении в электрическом поле логарифмически-нормального закона в распределении T в окрестности его типичного значения \bar{T} (1). Для сравнения эксцесс равномерного распределения равен $-1, 2$.

4. Итак, для одномерной неупорядоченной системы δ -образных потенциалов существует два режима: режим слабого рассеяния $\xi \gg a$, когда применимо борновское приближение, и предел сильного рассеяния $\xi \ll a$, переход между которыми можно изучать численно. В присутствии электрического поля прозрачность системы при сильном рассеянии и большой концентрации центров отличается от полевой зависимости, полученной в рамках коротковолнового приближения. Вблизи своего среднего значе-

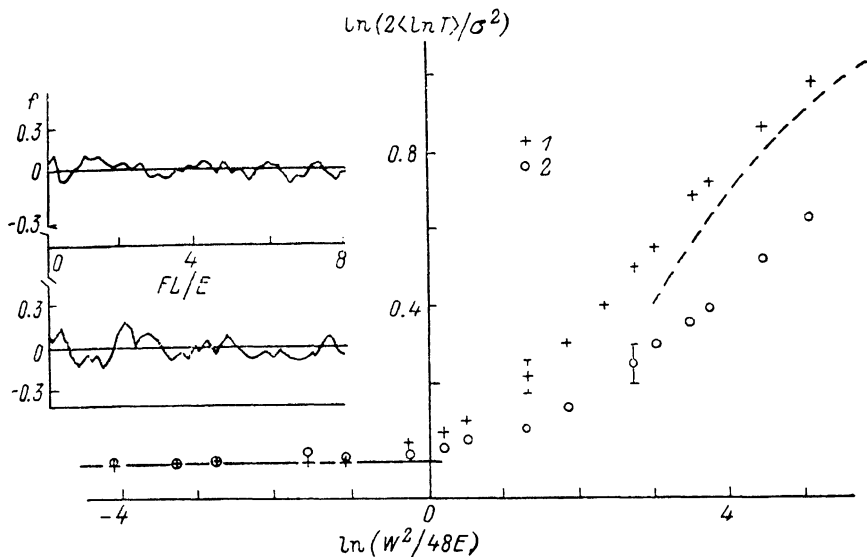


Рис. 5. Зависимость отношения среднего к дисперсии $2\langle \ln T \rangle / \sigma^2$ от параметра $W^2/48E$. Сплошная линия — (17), штриховая — (18).

ния величина $\ln T$ распределена по Гауссу не только в отсутствие, но и при наличии внешнего поля. Отметим, что по такому же закону распределены времена релаксации электронной плотности в одномерном диэлектрике [14], что также связано с нормальным распределением обратных радиусов локализации $(a/\xi) (E/FL) \ln(1+FL/E)$. По-видимому, имеется прямое соотношение между коэффициентом прозрачности и временем жизни волнового пакета в одномерном неупорядоченном образце конечной длины.

Авторы выражают глубокую признательность Б. Л. Альшутлеру, А. Г. Аронову, В. Н. Пригодину и Д. Г. Полякову за многочисленные полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Mott N. F., Twose W. D. // Adv. Phys. 1961. V. 10. N 38. P. 107—163. (Пер. с англ.: Mott Н., Туз у. // 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., José J. V., Economou E. N., Ping Sheng // Phys. Rev. Lett. 1983. V. 50. N 10. P. 764—767.
- [7] Cota E., José 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] Sak J., Kramer B. // Phys. Rev. B. 1981. V. 24. N 4. P. 1761—1770.
[10] Gasparian V. M., Altshuler B. L., Aronov A. G., Kasamanian Z. A. // Phys. Lett. A. 1988. V. 132. N 4. P. 201—205.
[11] Гаспарян В. М. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 162—171.
[12] Дмитриев А. П. // ЖЭТФ. 1989. Т. 95. № 1. С. 234—246.
[13] Flores J. C., Jauslin H. R., Enz C. P. // J. Phys.: Condens. Matter. 1989. V. 1. N 1. P. 123—133.
[14] Альтшулер Б. Л., Пригодин В. Н. // Письма в ЖЭТФ. 1988. Т. 47. № 1. С. 36—40; ФТТ. 1989. Т. 31. № 2. С. 135—143.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
8 августа 1989 г.