

УДК 548.4;539.2;529.2

©1995

О ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В АМОРФНЫХ СРЕДАХ ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

В.С. Филинов, Л.И. Подлубный

Институт высоких температур РАН, Москва
(Поступила в Редакцию 16 марта 1994 г.)

Для описания распространения и локализации электронов в случайных средах используются интегралы по путям и комплексный метод Монте-Карло. Рассчитаны второй и четвертый момент функции Грина стохастического стационарного уравнения Шредингера. Анализируется дисперсия квадрата модуля функции Грина в случайной среде. Получены численные результаты для одномерных и двумерных неупорядоченных систем. В одномерном случае численные результаты хорошо согласуются с аналитическими оценками. Обнаружены полюсные особенности вторых моментов функции Грина на центрах локализации электронов и резкие пики, прерывающие экспоненциальное затухание второго момента функции Грина. Обнаружена делокализация электронов во внешних электрических полях.

Более тридцати лет назад появились пионерские работы Андерсона и Мотта, посвященные локализации квантовых частиц в случайной решетке [1] и на примесных центрах рассеяния [2]. В этих работах доказано, что усиление беспорядка приводит к пространственному ограничению движения, и сформулирована и частично решена задача выяснения условий появления локализованных состояний. За прошедшее время получено много значительных результатов (см. подробные обзоры [3,4]), однако задача точного вычисления положения порогов подвижности и описания движения вблизи порогов еще далека от завершения.

Электрон в случайном поле хаотически расположенных в d -мерном пространстве рассеивающих центров либо локализован, либо может уходить на бесконечность — это зависит от энергии частицы, плотности и размерности системы. Для $d = 3$ в пределе больших времен и расстояний частица с достаточно большой энергией E описывается диффузионным уравнением. Рассеяние в низкоразмерных системах качественно отличается от случая $d = 3$. Согласно Мотту [2], диффузия частицы любой энергии в одномерных системах невозможна. Локализация электрона в одномерном случайном поле является полной, и статическая проводимость при температуре $T = 0$ равна нулю. Экспоненциальный характер асимптотики электронной плотности локализованных состояний был впервые получен в [5]; более строгое доказательство идеи Мотта дано Березинским [6].

В двумерных системах вопрос о локализации до конца не выяснен. В расчетах по скэйлинговой теории и в численных расчетах (см. обзор [7]) обнаружены пороги подвижности при $d = 2$, которые, возможно, не являются истинными, а просто отделяют области экспоненциально локализованных состояний от расположенных при больших энергиях состояний со степенным спаданием волновых функций.

При теоретическом исследовании кинетики примесного электрона в неупорядоченных системах обычно ограничиваются случаем достаточно слабого внешнего электрического поля и рассчитывают статическую проводимость, а также зависимость проводимости от частоты внешнего поля. В последнее время растет интерес к задачам физики твердого тела, в которых решающую роль играют особенности прохождения электронов в сильном внешнем электрическом поле F через случайную систему, в частности одномерную. Впервые эффект делокализации электрона в одномерной системе рассеивающих δ -центров в достаточно сильном электрическом поле напряженности $F > F_c$ (F_c — пороговое значение делокализации) был обнаружен в [8] (см. также [9–13]).

Зависимость длины локализации от внешнего электрического поля оказывается немонотонной: для полей $F > E_c$ возможны переходы электрона между отдельными центрами локализации, что приводит к отличной от нуля проводимости диффузионного происхождения. При $F < F_c$ электрон локализован, но спадание электронной плотности происходит не экспоненциально, а более медленно — степенным образом с показателем степени, зависящим от напряженности внешнего поля.

Отметим, что влияние внешнего магнитного поля на эффекты локализации в двумерных системах было обнаружено экспериментально и исследовалось теоретически. Магнитное поле подавляет локализацию и способствует делокализации (подробнее см. [7,14]).

К сожалению, аналитические методы решения проблемы в настоящее время не могут дать гарантированную область применимости получающихся приближенных результатов. Численными методами критерий локализации электрона в структурно неупорядоченной среде рассчитывался в [15]. В настоящей работе для расчета критерия локализации нами используется новый численный подход. При этом подходе для усредненной по ансамблю случайных неоднородностей функции Грина (ΦG) стохастического уравнения Шредингера, а также усредненного квадрата модуля ΦG и корреляционных функций получены выражения через модифицированные интегралы по траекториям [16]. Для их расчета используется недавно развитый комплексный метод Монте-Карло (ММК) [16,17]. Главным достоинством этого подхода является то, что полученные интегралы по траекториям зависят от функционалов, определяемых самоусредняемыми величинами. Не менее важна высокая эффективность ММК, позволяющая практически из первых принципов за разумные времена счета получить достаточно надежные результаты.

Для проверки данного подхода значительное внимание уделено исследованию одномерных неупорядоченных систем с мелкомасштабными случайными пространственными неоднородностями, для которых имеются аналитические и численные результаты [5,18–20].

С помощью ММК рассчитаны второй и четвертый момент ФГ стохастического стационарного уравнения Шредингера. Анализируется дисперсия квадрата модуля ФГ в случайной среде. Получены численные результаты для одномерных и двумерных неупорядоченных систем. Результаты для одномерных сред согласуются с аналитическими оценками. Обнаружены полюсные особенности вторых моментов ФГ на центрах локализации электронов и резкие пики, прерывающие экспоненциальное затухание второго момента ФГ. Обнаружена делокализация электронов во внешних электрических полях. Предварительные результаты обсуждаемого численного подхода были опубликованы в [21].

1. Критерий локализации

Рассмотрим уравнение Шредингера

$$-\frac{1}{2k^2}\Delta\Psi + \Omega\Psi = \Psi/2, \quad \Omega = \tilde{V}/2E. \quad (1)$$

Здесь $k^{-2} = \hbar^2/2mE$, m — масса квантовой частицы, а \tilde{V} — ее потенциальная энергия в поле N мелкомасштабных ($\sim \sigma'$) случайных неоднородностей V и крупномасштабном ($\sim L$) регулярном поле $W(\mathbf{r})$.

$$\tilde{V} = V + W, \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N V(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|/\sigma'). \quad (2)$$

Слагаемое $V(\mathbf{r})$ соответствует взаимодействию квантовой частицы со случайными рассеивателями. Для слабонеоднородного регулярного поля W имеем

$$W(\mathbf{r}) \simeq \langle \mathbf{r} - \mathbf{r}' | W'(\mathbf{r}') \rangle + \frac{1}{2} \langle \mathbf{r} - \mathbf{r}' | W'' | \mathbf{r} - \mathbf{r}' \rangle + \dots, \quad (3)$$

где скобки $\langle | \rangle$ — скалярное произведение двух векторов, $\langle \mathbf{r} - \mathbf{r}' | W'(\mathbf{r}') \rangle$ — первый дифференциал, $\langle \mathbf{r} - \mathbf{r}' | W'' | \mathbf{r} - \mathbf{r}' \rangle$ — второй дифференциал, $W''(\mathbf{r}')$ — матрица вторых производных.

Отметим, что крупномасштабные неоднородности обычно резко анизотропны, что позволяет пренебречь их изменением, например, в плоскости y, z и ограничиться учетом зависимости W лишь от x . Линейное и квадратичное по координатам $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ слагаемые соответствуют взаимодействию заряженной квантовой частицы с однородными электрическим и магнитным полями.

Известно (см. [4]), что рассмотрение усредненной по термостату одночастичной ФГ не позволяет сделать каких-либо выводов о локализованном или делокализованном характере состояний частицы в случайной среде. Надежным критерием локализации является условие обращения в нуль статических кинетических коэффициентов: электропроводности, диффузии и т.д. Такие кинетические характеристики определяются интегралами по пространственным переменным от усредненного по термостату квадрата модуля ФГ $P(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \overline{|G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E)|^2}$. Вычисление подобных интегралов комплексным ММК планируется в дальнейших работах. В данной работе в качестве простых критериев

локализации на случайно расположенных центрах используются существование полюсных особенностей на центрах локализации в точках \mathbf{r}' и экспоненциальное затухание волновой функции с увеличением расстояния от \mathbf{r}' [19]

$$-\ln(p) \approx |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/l(E, n). \quad (4)$$

Здесь $l(E, n)$ — радиус локализованного состояния, зависящий от энергии E квантовой частицы и плотности n рассеивающих центров термостата. Для удобства мы рассчитывали приведенные вероятности типа $p = |\overline{G}|^2/|G_0|^2$ (G_0 — ФГ свободной частицы).

Экспоненциальный характер асимптотики распределения электронной плотности локализованных состояний $p(x, E)$ в одномерной неупорядоченной системе был получен путем непосредственных аналитических расчетов в [5,6]. В [8-10] была вычислена вероятность $p^F(|x-x'|, E)$ перемещения заряженной частицы на расстояние $|x-x'|$ во внешнем электрическом поле F (крупномасштабная регулярная неоднородность) и случайном поле δ -центров рассеяния (мелкомасштабные неоднородности) без учета их взаимодействия (идеальный термостат). В пределе слабого поля $F \rightarrow 0$ эти результаты совпадают с вероятностью $p^0(x, x')$, полученной в [5,6]. Для конечных, но малых полей и больших расстояний из [8-10] следует, что спадание p^F с ростом $|x-x'|$ происходит не экспоненциально, а более медленным степенным образом (n — плотность рассеивателей).

$$p^F \sim \left| \ln \frac{x}{x'} \right|^{-3/2} \left| \frac{x'}{x} \right|^{(1-\alpha)^2/8\alpha}, \quad \alpha = F/(2mnV_0^2). \quad (5)$$

Таким образом, электрическое поле ослабляет локализацию. Пороговое значение поля определяется соотношением $\alpha = 1$ (см. [8]).

Результаты, очень похожие на (5), получили авторы [12] для среднего коэффициента прохождения электрона через одномерную неупорядоченную цепочку во внешнем поле. Однако показатель степенной зависимости от расстояния, согласно [12], равен $1/16\alpha$, так что для среднего коэффициента прохождения порог при $\alpha = 1$ отсутствует.

Развитый нами подход к расчету $|\overline{G}|^2$ решает задачу на основании первых принципов. Отметим, что корреляционная функция электрона и кинетические коэффициенты в сильном электрическом поле вычислялись ранее одним из авторов в [22]; плотностные поправки на многократное рассеивание учитывались в [23].

2. Расчет вероятности прохождения квантовых частиц в случайной среде методом Монте-Карло

Замкнутое выражение для вероятности прохождения квантовых частиц и волн (5) получено для δ -образных случайных неоднородностей в пространстве с числом измерений $d = 1$. Нами при использовании комплекснозначного ММК мелкомасштабные неоднородности аппроксимировались потенциальными ямами или барьерами прямоугольного профиля высотой $\xi = V(|0|)/2E$ и шириной α . Всюду ниже рассмотрены случаи $d = 1$ и $d = 2$; длины обезразмерены $k^{-1} = \lambda/2\pi$, а $\sigma = 2\sigma'$.

Кратко рассмотрим представление ФГ и ее моментов в виде модифицированных интегралов по траекториям. Подробное изложение приведено в [16].

Для ФГ уравнения (1) $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z)$ имеет место равенство

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z) = \int_0^{\infty} \exp(izl) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l) dl, \quad (6)$$

где $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l)$ — ФГ уравнения $i\partial\varphi/dl = \left[-\Delta/2 + \sum_{j=0}^N V(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|/\sigma')\right]\varphi(\mathbf{r})$.
ФГ $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l)$ можно записать в виде интеграла Фейнмана [16, 24]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l) = i\theta(l)(2\pi i\tau)^{-Md/2} \int \dots \int \exp(i\tau)^{-1} S[\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_M] d\{\mathbf{r}_m\}. \quad (7)$$

В (7) траектории аппроксимированы ломаными линиями с вершинами в точках \mathbf{r}_m в «моменты времени» $l_m = \tau m$, $\tau = l/M$, $m = 0, 1, \dots, M$, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}'$, $\mathbf{r}_M = \mathbf{r}$, $d\{\mathbf{r}_m\} = d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_{M-1}$, d — размерность пространства, $S = (\tilde{\mathbf{r}}|K|\tilde{\mathbf{r}}) - \tau^2 \sum_m V(\mathbf{r}_m, \tilde{\mathbf{R}}) - \tau^2 \sum_m W(\mathbf{r}_m)$, $V(\mathbf{r}_m, \tilde{\mathbf{R}}) = \sum_{j=0}^N V(|\mathbf{r}_m - \mathbf{R}_j|/\sigma')$, $(\tilde{\mathbf{r}}|K|\tilde{\mathbf{r}}) = \sum_m |\mathbf{r}_{m+1} - \mathbf{r}_m|^2$ — квадратичная форма, $|\tilde{\mathbf{r}}) - d(M+1)$ — мерный вектор с компонентами $\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_M$.

Рассмотрим функцию $\overline{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)}$, усредненную по положениям рассеивателей, конфигурации которых описываются плотностью вероятности $p(\mathbf{R}_j)/Q$, $Q = \int \dots \int p(\mathbf{R}_j) \prod_j d\mathbf{R}_j$,

$$\begin{aligned} \overline{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)} &= \int_0^{\infty} dl' \int_0^{\infty} dl'' \exp(i(l' - l'')/2)\theta(l')\theta(l'') \times \\ &\times \int \dots \int \prod_j d\mathbf{R}_j p(\mathbf{R}_j) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l') G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', l'') / Q = \\ &= \int_0^{\infty} dl' \int_0^{\infty} dl'' \exp(i(l' - l'')/2)\theta(l')\theta(l'') (2\pi i\tau')^{-M\nu/2} (-2\pi i\tau'')^{-M\nu/2} \times \\ &\times \int \dots \int d\{\mathbf{r}'_m\} \int \dots \int d\{\mathbf{r}''_m\} \exp\left(i(\tilde{\mathbf{r}}'|K|\tilde{\mathbf{r}}')/2\tau' - i(\tilde{\mathbf{r}}''|K|\tilde{\mathbf{r}}'')/2\tau'' + \right. \\ &\left. + \sum_{t=0}^{\infty} n^t W_t/t! - i(\tau')^2 \sum_m W(\mathbf{r}'_m) + i(\tau'')^2 \sum_m W(\mathbf{r}''_m)\right), \quad (8) \end{aligned}$$

где W_t — групповые интегралы, явные выражения для которых можно найти из решения соответствующих систем алгебраических уравнений

[²⁵]; $W_0 = 0$, $W_1 = \int \dots \int d\mathbf{R}_1 F_1$, $W_2 = \int \dots \int d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 F_1 F_2 (g_{12} - 1)$ и т.д. Здесь

$$F = \exp\left(-i\tau' \sum_{m=0}^{-1} V(|\mathbf{r}'_m - \mathbf{R}|/\sigma') + i\tau'' \sum_{m=0}^{M-1} V(|\mathbf{r}''_m - \mathbf{R}|/\sigma')\right) - 1,$$

$g_{12} = g(|\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|)$ — двухчастичная коррелятивная функция [²⁶]. Для газа идеальных рассеивателей ($n\sigma^3 \ll 1$ в ряду $\sum_{t=0}^{\infty} n^t W_t/t!$ отличен от нуля только W_1).

Используя метод перевала для вычисления интегралов по переменным t' и t'' , получаем окончательное выражение для $\overline{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)}$

$$\begin{aligned} & \overline{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 1/2)} = \\ & = M \int \dots \int d\{\mathbf{r}'_m\} \int \dots \int d\{\mathbf{r}''_m\} (2\pi i \zeta')^{-(M\nu-1)/2} (2\pi i \zeta'')^{-(M\nu-1)/2} \times \\ & \times (\gamma'(\gamma'')^*)^{-1/2} \exp[i\langle \tilde{\mathbf{r}}' | K | \tilde{\mathbf{r}}' \rangle / \zeta' - i\langle \tilde{\mathbf{r}}'' | K | \tilde{\mathbf{r}}'' \rangle / \zeta'' + W_1 + \ln(S(z\gamma')S^*(z\gamma''))]. \end{aligned} \quad (9)$$

В W_1 временная переменная заменена функционалом z

$$z^2 = M \langle \tilde{\mathbf{r}} | K | \tilde{\mathbf{r}} \rangle / \gamma, \quad \gamma = 1 - \frac{2}{M} \sum_m W(\mathbf{r}_m), \quad \zeta = z/M,$$

$$S(z\gamma) = \sum_{a=0}^{A-1} (-2iz\gamma)^{-a} (A+a-1)! / (a!(A-a-1)!), \quad A = (M\nu - 1)/2 - 1.$$

Применение метода перевала приводит к ограничению $n\sigma^3 \xi \ll 1$ для справедливости выражения (9).

Расчеты $\overline{GG^*}$ проведены с помощью комплекснозначного ММК, развитого в [^{17,27-29}].

3. Результаты расчетов

Перейдем к обсуждению результатов расчетов. Были исследованы зависимости нормированных вторых $p = \overline{GG^*}/G_0 G_0^*$ и четвертых моментов $p = \overline{GG^*GG^*}/G_0 G_0^* G_0 G_0^*$ от характерных параметров $V(|0|)/2E = \xi$, $|x - x'|$, σ и $n\sigma$. Здесь ограничимся обсуждением некоторых зависимостей от $|x - x'|$, ξ и σ . Остальные результаты будут опубликованы в последующих работах. Для качественного анализа и объяснения полученных зависимостей воспользуемся результатами [^{18,19}]. Из них следует, что а) при локализации в одномерных системах на малых расстояниях ($\leq \lambda$) ($|x - x'| \leq 2\pi$) второй момент ФГ $\overline{GG^*}$ в непоглощающих случайных средах имеет полюсную особенность; б) профиль $\check{V}(x) = \sum_{j=1}^N V(x - x_j) - \bar{V}$ для каждой конфигурации рассеивателей

(\bar{V} — среднее значение по всем конфигурациям) можно рассматривать как случайный процесс с малыми флуктуациями относительно \bar{V} . Резко меняющуюся часть корреляционной функции процесса $B_V(x - x')$ будем аппроксимировать спадающей экспонентой с характерным масштабом σ , т.е. $B_V(x - x') = \langle \bar{V}(x)\bar{V}(x') \rangle \approx \sigma_V^2 \exp(-|x - x'|/\sigma)$, где σ — размер рассеивателя, равный радиусу корреляции, а σ_V^2 — неизвестная величина, пропорциональная ξ^2 . Для малых флуктуаций $\bar{V}(x)$ ($\sigma_V^2 \ll 1$) после усреднения по быстрым осцилляциям величина $\overline{GG^*}$ имеет асимптотический вид $A \exp(-2D|x - x'|)$ для $D|x - x'| \ll \pi^2$, где A константа, а коэффициент D равен [18,19]

$$D = \sigma_V^2 \sigma / 2(1 + 4\sigma^2). \quad (10)$$

Проверим существование полюсной особенности и возможность аппроксимации результатов ММК с помощью данных формул.

1) *Зависимость от $|x - x'|$.* На рис. 1 для случая $d = 1$ представлены результаты ММК для $10 \log(p)$ в зависимости от расстояния $|x - x'|$ для фиксированных значений остальных параметров $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$ и $\sigma = 4\pi/9$. Линия 1 проведена через точки, полученные ММК для второго момента функции Грина $\overline{GG^*}$, линия 3 представляет аналогичные результаты для четвертого момента $\overline{GG^*GG^*}$, позволяющего рассчитать дисперсию GG^* в случайной среде. Сплошная прямая 2 является наилучшим линейным приближением результатов ММК для

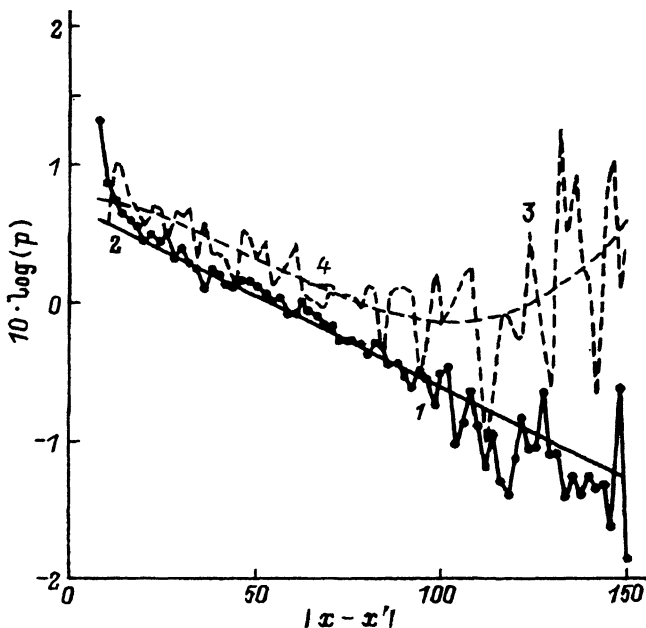


Рис. 1. Зависимость $10 \log(p)$ от $|x - x'|$; $d = 1$, $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$, $\sigma = 4\pi/9$.

1 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$, 2 — наилучшее линейное приближение результатов ММК для $\overline{GG^*}$, 3 — результаты ММК для $\overline{GG^*GG^*}$.

$\overline{GG^*}$. Аналогично плавная штриховая линия аппроксимирует результаты для четвертого момента $\overline{GG^*GG^*}$. Отметим также, что в интервале $8 < |x - x'| < 100$ результаты ММК для прямоугольных ям или барьеров и аналогичных сглаженных случайных неоднородностей практически неразличимы.

Результаты расчетов ММК в области расстояний $6 < |x - x'| < 16$ указывает на существование особенности, которая, по-видимому, связана с локализацией электронов. Данный результат согласуется с выводами работ [18,19]. В интервале расстояний $16 < |x - x'| < 100$ зависимости 1 и 2 практически совпадают, что указывает на экспоненциальный характер убывания $\overline{GG^*}$ в этой области ($\overline{GG^*} \approx A \exp(-2D|x - x'|)$ для $D|x - x'| \ll \pi^2$).

Представляет интерес появление нарастающих осцилляций $\overline{GG^*}$ в области расстояний $100 < |x - x'| < 150$. Как показали расчеты ММК, амплитуда их колебаний зависит от числа разбиения M траекторий на аппроксимирующие их прямолинейные отрезки, однако полностью устранить нарастающие осцилляции за счет увеличения M не удастся, поэтому обсудим возможность их физической интерпретации. Как показали расчеты ММК, относительная величина дисперсии GG^* $\beta = (\overline{GG^*} - \overline{GG^*})^2 / (\overline{GG^*})^2$ с ростом $|x - x'|$ начинает превосходить единицу в области $|x - x'| > 100$. Это означает, что в случайной среде характерные изменения GG^* становятся больше или порядка средней величины $\overline{GG^*}$, т.е. на расстояниях, превышающих несколько десятков средних расстояний между рассеивателями, в системе возможно возникновение интерференционных всплесков GG^* (типа каустик). В [3,4] отмечается, что GG^* не является самоусредняемой величиной. Это означает, что отдельные репрезентативные конфигурации могут давать главный (экспоненциально большой) вклад в среднюю величину $\overline{GG^*}$ для данных фиксированных значений x' и x . Возможность существования маловероятных репрезентативных конфигураций, отвечающих экспоненциально большим всплескам GG^* внутри среды и нарушающих экспоненциальный спад средней $\overline{GG^*}$, отмечается также в работе [30].

Таким образом, результаты расчетов ММК позволяют проинтерпретировать возникновение (рис. 1) осцилляций $\overline{GG^*}$ при $|x - x'| > 100$ как следствие появления на больших расстояниях $|x - x'|$ репрезентативных конфигураций, дающих главный вклад в самоусредняемую величину $\overline{GG^*}$, и возникновения в системе случайных интерференционных всплесков.

В области слабых флуктуаций применимы различного рода теории возмущений [4-15], дающие гладкие зависимости $\overline{GG^*}$ от $|x - x'|$. Аналитическое рассмотрение области сильных флуктуаций вряд ли возможно. Более подробное исследование этого вопроса заслуживает отдельного рассмотрения.

2). *Зависимость от расстояния для двумерной среды.* На рис. 2 представлены результаты расчетов в случае двумерной случайной среды ($d = 2$) для фиксированных значений следующих параметров: $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$ и $\sigma = 4\pi/9$. Рассмотрим полученные функции

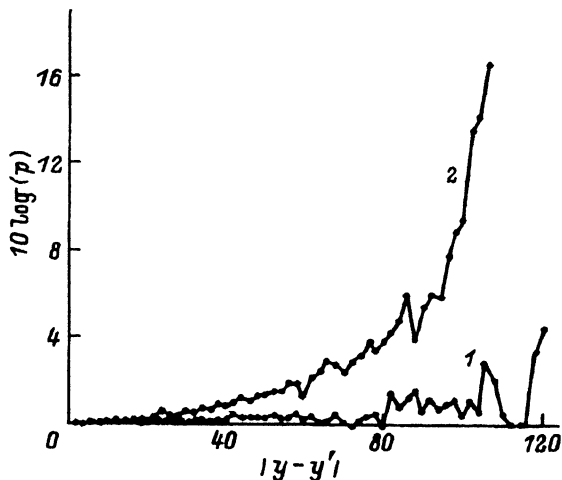


Рис. 2. Зависимость $10 \log(p)$ от $|y - y'|$; $d = 2$, $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$, $\sigma = 4\pi/9$.

1 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$,
2 — результаты ММК для $\overline{GG^*GG^*}$.

ональные зависимости от расстояния до источника $\rho = |y - y'|$ (для простоты полагаем $x = 0$ и $x' = 0$). Для $\overline{GG^*}$ (линия 1) практически все точки в логарифмическом масштабе осциллируют около нуля, что свидетельствует о слабом отличии $\overline{GG^*}$ от $G_0G_0^*$ и об отсутствии локализации. Относительная дисперсия $\overline{GG^*}$, определяемая поведением линии 2, представляющей результаты для $\overline{GG^*GG^*}$, начинает превосходить единицу в области $|y - y'| > 80$, что, как и в предыдущем случае, является указанием на возможность появления в системе редких конфигураций, дающих при фиксированных ρ' и ρ главный вклад в средние величины типа $\overline{GG^*}$, за счет экспоненциально больших интерференционных всплесков $\overline{GG^*}$.

3). Зависимость от ξ . На рис. 3 представлена зависимость $10 \sqrt{-\log(p)}$ для $\overline{GG^*}$ от параметра $|\xi|$ при $d = 1$ для фиксированных значений $|x - x'| = 138$, $n\sigma = \pi/6$ и $\sigma = 4\pi/9$. Результаты расчета ММК представлены зависимостями 1, 3, 5 и 7, а прямые 2, 4, 6 и 8 — соответствующие или наилучшие линейные приближения. Зависимости 1

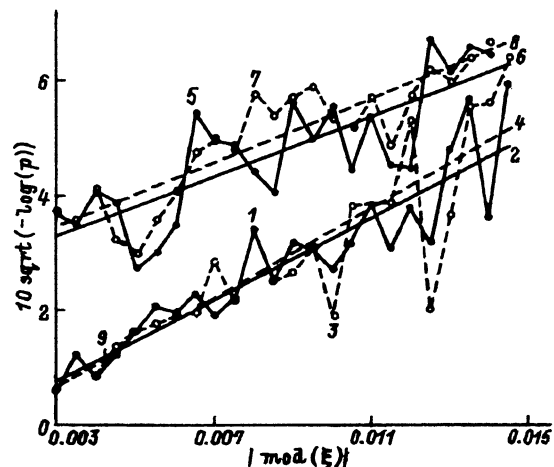


Рис. 3. Зависимость $10 \log(p)$ от $|\xi|$; $d = 1$, $|x - x'| = 138$, $n\sigma = \pi/6$, $\sigma = 4\pi/9$.

При внешнем электрическом поле $F = 0$: 1 — результаты ММК для $\xi > 0$, 2 — наилучшее линейное приближение результатов ММК для $\xi > 0$, 3 — результаты ММК для $\xi < 0$, 4 — наилучшее линейное приближение результатов ММК для $\xi < 0$. При внешнем электрическом поле $F = -0.001$, 5 — результаты ММК для $\xi > 0$, 6 — наилучшее линейное приближение результатов ММК для $\xi > 0$, 7 — результаты ММК для $\xi < 0$, 8 — наилучшее линейное приближение результатов расчета ММК для $\xi < 0$, 9 — статистическая погрешность расчета ММК.

($\xi > 0$) и $\mathcal{J}(\xi < 0)$ получены в отсутствие внешнего электрического поля ($W' = F = 0$), а зависимости $\mathcal{J}(\xi > 0)$ и $\mathcal{J}(\xi < 0)$ соответствуют слабо-му ускоряющему электрическому полю ($F = -0.001$). Как следует из рис. 3, в пределах статистической ошибки (вертикальный отрезок \mathcal{J}) результаты расчета ММК, полученные при $F = 0$, практически не зависят от изменения знака ξ в области малых ξ ($0 < |\xi| < 0.01$). Соответствующие им наилучшие линейные приближения (2 и 4) практически совпадают. Представленные результаты показывают, что второй момент $\overline{GG^*}$ пропорционален экспоненте с показателем, квадратично зависящим от ξ , по крайней мере в интервале (0–0.015). Это согласуется с широко известными аналитическими результатами [3–16, 18–20].

Результат воздействия слабого электрического поля ($F = -0.001$) представлен зависимостями $\mathcal{J}(\xi > 0)$ и $\mathcal{J}(\xi < 0)$, которые аналогичны зависимостям 1 и 3. Присутствие поля приводит к увеличению расхождения между точками ММК для $\xi > 0$ и $\xi < 0$ и возникновению крупномасштабных осцилляций, однако наилучшие линейные приближения 6 и 8 по-прежнему близки друг к другу.

4). Зависимость от $|x - x'|$ в присутствии внешних электрических полей. На рис. 4 для случая $d = 1$ представлены результаты ММК для $10 \log(p)$ в зависимости от расстояния $|x - x'|$ для следующих значений остальных параметров: $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$ и $\sigma = 4\pi/9$. Линия 1 проведена через точки, полученные ММК для второго момента $\Phi\Gamma \overline{GG^*}$ при отсутствии внешнего поля ($F = 0$, данные результаты представлены

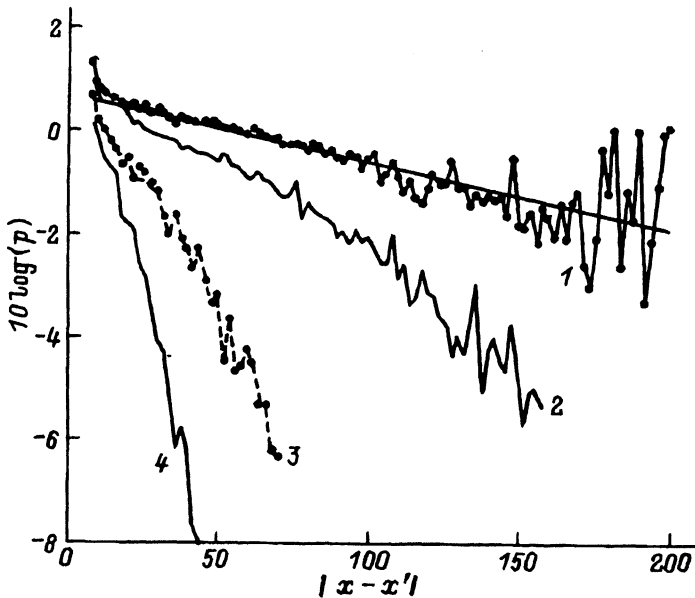


Рис. 4. Зависимость $10 \log(p)$ от $|x - x'|$ во внешних электрических полях; $d = 1$, $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$, $\sigma = 4\pi/9$.

1 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$ ($F = 0$), 2 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$ ($F = -0.0015$), 3 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$ ($F = -0.008$), 4 — результаты ММК для $\overline{GG^*}$ ($F = -0.02$).

на рис. 1). Линии 2, 3 и 4 представляют аналогичные результаты во внешних полях $F = -0.0015$, -0.008 и -0.02 соответственно. Отметим, что в интервале $6 < |x - x'| < 16$ электрические поля деформируют полюсные особенности, связанные с локализацией электронов около источника. На расстояниях $16 < |x - x'|$ электрическое поле увеличивает скорость экспоненциального распада $\overline{GG^*}$.

С увеличением $|x - x'|$ длина волны λ плавно уменьшается за счет ускорения электронов. В результате роль интерференционных эффектов снижается, и при определенном значении $|x - x'|$ второй момент $\overline{GG^*}$ скачкообразно принимает значение $G_0 G_0^*$, что указывает на внезапную делокализацию электронов. Уменьшение или увеличение F приводит к сдвигу этого скачка $\overline{GG^*}$ вправо или влево соответственно. Анализ поведения цепей Маркова в этой области указывает на резкое «схлопывание» области главного вклада в интеграл по траекториям. На рис. 4 линии 2, 3 и 4 обрываются при наступлении скачка $\overline{GG^*}$. Похожая ситуация обнаружена в [8] в задаче о распространении электрона в среде хаотических рассеивателей, помещенной во внешнем электрическом поле. В работе [8] доказано, что для достаточно сильных внешних полей в однородной случайной среде возможен срыв локализации электронов и изменение экспоненциального характера убывания $\overline{GG^*}$. Данное явление интерпретируется как потеря устойчивости такой системы во внешнем поле за счет фактически бесстолкновительного ухода электронов по полю на бесконечность. Таким образом, для достаточно коротких волн влияние интерференции рассеянных волн резко падает, приводя к исчезновению экспоненциального спада $\overline{GG^*}$ (см. (5) и обсуждение в предыдущих разделах).

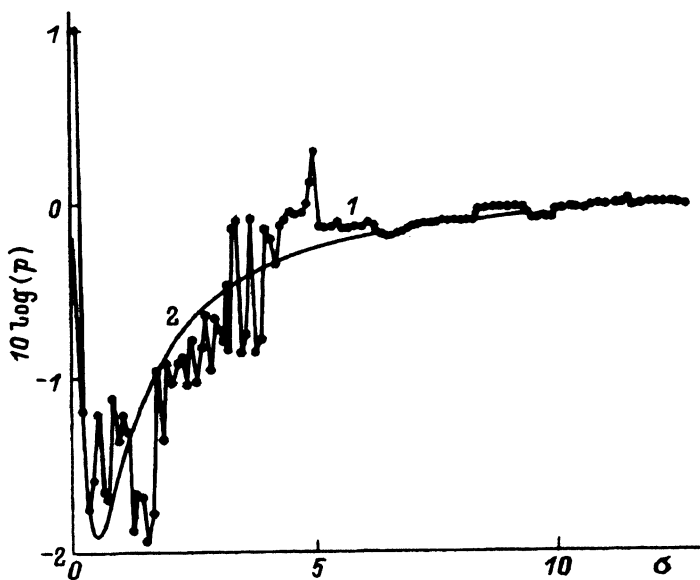


Рис. 5. Зависимость $10 \log(p)$ от σ ; $d = 1$, $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$, $|x - x'| = 138$. 1 — результаты ММК, 2 — зависимость (10).

5). *Зависимость от σ* . Рассмотрим зависимость $\overline{GG^*}$ от размера рассеивателей в одномерном случае при тех же характерных значениях параметров: $\xi = 0.015$, $n\sigma = \pi/6$ и $|x - x'| = 138$. На рис. 5 линией 1 представлены результаты расчета ММК величины $10 \log(p)$ для $\overline{GG^*}$ как функции от σ . Проверим возможность аппроксимации линии 1 аналитической зависимостью (10), которая представлена на рис. 5 кривой 2. Для аналитической аппроксимации $\overline{GG^*}$ были выбраны две точки, рассчитанные ММК, в области плавного поведения линии 1. Как следует из рис. 5, практически все остальные точки, рассчитанные с помощью ММК, осциллируют вокруг линии 1.

Чрезвычайно интересным является различие в поведении результатов ММК в областях $\sigma > 5$ и $\sigma < 5$. Расчет ММК четвертого момента $\overline{GG^*GG^*}$ показал, что в области $\sigma < 5$ начинается чрезвычайно резкий рост относительной дисперсии $\overline{GG^*}$. Это позволяет сделать вывод о том, что гладкая часть зависимости 1 (для $\sigma > 5$) соответствует режиму слабых флуктуаций $\overline{GG^*}$, а область $\sigma < 5$ соответствует режиму сильных флуктуаций $\overline{GG^*}$. Уменьшение σ при фиксированном параметре $n\sigma$ приводит к росту плотности рассеивателей и, следовательно, к уменьшению среднего расстояния между ними. Расчет ММК проводился при фиксированной величине $|x - x'|$, поэтому при малых σ расстояние $|x - x'|$ становится много больше среднего расстояния между рассеивателями, что и приводит к возникновению редких репрезентативных конфигураций рассеивателей, дающих главный вклад в $\overline{GG^*}$.

Авторы статьи выражают искреннюю благодарность В.И.Кляцкину за обсуждение статьи и ценные замечания.

Список литературы

- [1] Anderson P.W. // Phys. Rev. 1958. V. 109. P. 1492-1499.
- [2] Mott N.F., Twose W.D. // Adv. Phys. 1961. V. 10. P. 107-116.
- [3] Гредескул С.А., Фрейлихер В.Д. // УФН. 1990. Т. 160. С. 239-246.
- [4] Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М.: Наука, 1982.
- [5] Гоголин А.А., Мельников В.И., Рашба Э.И. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 327-338.
- [6] Березинский В.Л. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 1251-1262.
- [7] Садовский М.В. // УФН. 1981. Т. 133. С. 223-235.
- [8] Пригодин В.М. // ЖЭТФ. 1980. Т. 66. С. 233-244.
- [9] Альтшулер Б.Л., Пригодин В.Н. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 1. С. 135-143.
- [10] Kirkpatrick T.R. // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. P. 780-794.
- [11] Гаспарян В.М., Жарекешев И.Х. // ФТТ. 1990. Т. 32. № 2. С. 456-464.
- [12] Перель В.И., Поляков Д.Г. // ЖЭТФ. 1984. Т. 86. С. 352-366.
- [13] Аронов А.Г., Ивченко Е.Л. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 3. С. 948-954.
- [14] Белевцев Б.И. // УФН. 1990. Т. 160. С. 65-71.
- [15] Гинзбург Л.П. // ФТТ. 1992. Т. 34. № 1. С. 164-167.
- [16] Filinov V.S. // Waves in Random Media. 1991. V. 2. P. 141-151.
- [17] Filinov V.S. // Nucl. Phys. B. 1986. V. 271. P. 717-725.
- [18] Кляцкин В.И. Метод погружения в теории распространения волн. М.: Наука, 1986.
- [19] Кляцкин В.И. // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1991. Т. 27. С. 45-66.
- [20] Кляцкин В.И., Саичев А.И. // УФН. 1992. Т. 162. С. 161-172.
- [21] Filinov V.S., Podlubny L.I. // Teubner-Texte zur Physik. Stuttgart, 1992. Bd. 26. S. 35-42.

- [22] Подлубный Л.И. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С.621-629.
- [23] Подлубный Л.И. // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. С.687-697.
- [24] Филинов В.С. // Изв. вузов. Радиофизика. 1989. Т. 32. С. 1368-1375.
- [25] Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С. Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. М.: Наука, 1981.
- [26] Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И. Введение в статистическую радиофизику. М.: Наука, 1978. Т. 2.
- [27] Doll J.D., Beek T.L. // J. Chem. Phys. 1988. V. 89. P. 5753-5766.
- [28] Doll J.D., Freeman D.L., Gillian M.J. // Chem. Phys. Lett. 1988. V. 143. P. 277-284.
- [29] Makri N., Miller W.H. // J. Chem. Phys. 1988. V. 89. P. 2170-2181.
- [30] Лифшиц И.М., Кирпиченков В.Я. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. С.989-995.