©1994 г.

ОБ ЭЛЕКТРОННОЙ ПРОВОДИМОСТИ ЗЕРКАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СИСТЕМЫ

А.Г.Моисеев, М.В.Энтин[†]

Новосибирский государственный технический университет, 630092, Новосибирск, Россия
[†] Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук, 630090, Новосибирск, Россия
(Получена 14 января 1994 г. Принята к печати 25 февраля 1994 г.)

Изучаются электронные состояния в зеркально-симметричной неупорядоченной системе с потенциалом $U(x) = -\sum |U_n| [\delta(x+a_n) + \delta(x-a_n)]$, где $a_n > 0$ случайны. Показано, что все состояния в системе остаются локализованными. Найдено, что низкочастотная проводимость пропорциональна первой степени частоты.

Хорошо известно, что статическая проводимость при нулевой температуре в неупорядоченных системах с размерностью ниже 2 отсутствует [1]. Это связано с локализацией электронов в таких системах. Локализация обусловлена с точки зрения модели Андерсона–Мотта статистическим разбросом уровней. Естественно, эта аргументация базируется на гипотезе об отсутствии дальних корреляций потенциала в исходной системе. Тем не менее возможны такие неупорядоченные системы, в которых такая корреляция присутствует на сколь угодно больших расстояниях. В этих системах правильность выводов Мотта должна быть исследована специально.

К возможным таким системам можно, например, отнести сложные кристаллы с большим числом атомов в элементарной ячейке $N \gg 1$. В них имеется идеальный порядок на размерах порядка постоянной решетки при отсутствии ближнего порядка на межатомном расстоянии. Это приводит к тому, что состояния электрона описываются делокализованными блоховскими функциями. В то же время на размере элементарной ячейки состояния электрона напоминают либо делокализованные, либо локализованные состояния на одном или нескольких атомах. Мы будем в данной работе изучать другую неупорядоченную систему, в которой существует корреляция потенциала на сколь угодно больших расстояниях: структуру, построенную из двух зеркально-симметричных неупорядоченных полубесконечных сред. В такой системе потенциал, в котором движутся электроны случаен, но обладает симметрией относительно отражения в плоскости $U(x,y,z) = U(-x,y,z)$.

Очевидно, не представляет больших сложностей синтезировать одномерную сверхрешетку из апериодически расположенных квантовых ям GaAs–GaAlAs. Такая решетка может быть создана и зеркально-симметричной. Подобные системы встречаются и среди молекул. Так ряд органических красителей построен на основе длинной цепочки из сопряженных связей с дополнительными группами. При этом молекулы с целью получения высокого цветового контраста синтезируются зеркально-симметричными.

В данной работе найдена частотная зависимость электронной проводимости при T=0 K для одномерной бесконечной неупорядоченной системы, когда потенциал является четной функцией координаты x. Четность неупорядоченного потенциала обусловливает идеальную корреляцию потенциала в точках x и $-x$ при $x \to \infty$. Это отличает данную неупорядоченную систему от тех неупорядоченных структур, которые исследуются в книге [1] и характеризуются исчезновением корреляции потенциала в бесконечно удаленных друг от друга точках.

В качестве неупорядоченного потенциала $U(x)$ выбирается потенциал вида

$$U(x) = -\sum_n |U_n| \Big[\delta(x+a_n) + \delta(x-a_n)\Big], \qquad a_n > 0, \tag{1}$$

симметричный относительно пространственной инверсии.

Для качественного понимания ситуации мы можем стартовать от исходно неупорядоченного потенциала на бесконечной прямой:

$$U(x) = -\sum_n |U_n|\, \delta(x-a_n), \qquad a_n > 0, \quad a_n < 0. \tag{2}$$

Все волновые функции в таком потенциале локализованы. Если разброс амплитуд U_n дельта-ям велик, то эти функции приблизительно совпадают с собственными функциями одиночных δ-ям $\exp(-\alpha_n|x-a_n|)$, где $\alpha_n = |U_n|$, а энергия связи равна $|U_n|^2/2$ ($m_e = \hbar = 1$).

Рассматривая симметричную задачу с потенциалом (1), мы можем взять эти функции в качестве базисных. Решениями нулевого приближения являются симметричные и антисимметричные комбинации

$$\psi_{s,a}(x,a_n) = \Big[\exp(-\alpha_n|x-a_n|) \pm \exp(-\alpha_n|x+a_n|)\Big](\alpha_n/2)^{1/2} \tag{3}$$

при условии $(\alpha_n)^{-1} \ll a_n$.

Стационарным состояниям (3) соответствуют энергии

$$\omega_s(a_n) = \Big\langle \psi_s(a_n)|\hat H|\psi_s(a_n)\Big\rangle, \qquad \omega_a(a_n) = \Big\langle \psi_a(a_n)|\hat H|\psi_a(a_n)\Big\rangle. \tag{4}$$

Разность $\omega_0(a_n)$ энергий между антисимметричными и симметричными состояниями экспоненциально убывает с a_n:

$$\omega_0 = \Delta_n\Big[2\alpha_n a_n \exp(-2\alpha_n a_n)\Big], \tag{5}$$

где $\Delta_n = |U_n|^2$. Симметричность волновых функций (3) приводит к их слабой локализации. Действительно, если использовать выражения

$$\left\langle \psi_s(a_n)|\hat{X}^2|\psi_s(a_n)\right\rangle = \left\langle \psi_a(a_n)|\hat{X}^2|\psi_a(a_n)\right\rangle = a_n^2 \tag{6}$$

для размера локализации, то при $a_n \to \infty$ размер локализации расходится. В то же время волновая функция остается экспоненциально малой вне окрестностей α_n^{-1} вблизи $x = \pm a_n$, т.е. размер области, внутри которой в основном сосредоточен электрон, ограничен при $\alpha_n \to \infty$. Мы будем называть a_n длиной корреляции волновой функции, в отличие от радиуса локализации α_n^{-1}.

Для состояний с большим a_n расходится дипольный матричный элемент перехода между симметричным и антисимметричным состояниями с одинаковыми длинами корреляции. Это приводит к отличию низкочастотной проводимости от случая неупорядоченной системы, в которой корреляция потенциала исчезает в бесконечно удаленных друг от друга точках.

Для расчета электрического тока, возникающего при наложении на неупорядоченную систему потенциала,

$$W(x,t) = \begin{cases} 0, & t < 0 \\ -q_e E_0 x \cos(\omega t), & t > 0. \end{cases} \tag{7}$$

Проанализируем матричные элементы перехода. Переходы типа s–s и a–a запрещены по симметрии. Матричный элемент перехода между симметричным и антисимметричным состояниями с одинаковыми длинами корреляции a_n имеет вид

$$\left\langle \psi_s(a_n)|\hat{X}|\psi_a(a_n)\right\rangle = a_n. \tag{8}$$

На малых частотах достаточно учитывать переходы только между симметричными и антисимметричными состояниями с одинаковыми длинами корреляции. Это объясняется тем, что недиагональные по n матричные элементы оператора $\hat{x}$ экспоненциально малы по сравнению с диагональными:

$$\left\langle \psi_s(a_n)|\hat{X}|\psi_a(a_{n'})\right\rangle = 1/2\left[(a_n + a_{n'}) + \alpha_n\left(a_{n'}^2 - a_n^2\right)\right]\exp\left(-\alpha_n\left|a_n - a_{n'}\right|\right).$$

Такой подход позволяет представить рассматриваемую систему как совокупность двухуровневых подсистем $\psi_s(x,a_n)$ и $\psi_a(x,a_n)$, когда переходы возможны только в каждой двухуровневой подсистеме.

Для расчета микроскопического электрического тока, обусловленного переходом электрона из симметричного состояния при $t = 0$ в антисимметричное состояние при наложении поля (7), волновая функция электрона может быть представлена в виде

$$\psi(x,a_n,t) = \psi_s(x,a_n)C_s(t)e^{-i\omega_s(a_n)t} + \psi_a(x,a_n)C_a(t)e^{-i\omega_a(a_n)t}. \tag{9}$$

В пренебрежение переходами в непрерывный спектр амплитуды $C_s(t)$, $C_a(t)$ могут быть найдены в рамках двухуровневой модели (например, формула с. 160 из [2]):

$$\begin{cases} C_s(t) = \Big[\cos(0.5Rt) - i(\Delta\omega/R)\sin(0.5Rt)\Big]\exp(i0.5\Delta\omega t), \\ C_a(t) = (-iW_{as}/\hbar R)\sin(0.5Rt)\exp(-i0.5\Delta\omega t), \end{cases} \tag{10}$$

где $\Delta\omega = \omega - \omega_0(a_n)$.

$$W_{as} = \Big\langle \psi_a(a_n)\big|-q_e E_0 \hat{X}\big|\psi_s(a_n)\Big\rangle = -q_e E_0 a_n \qquad (\alpha_n a_n \gg 1),$$

$$R = \left[W_{as}^2 + (\Delta\omega)^2\right]^{1/2}.$$

Одноэлектронный микроскопический ток

$$J(x, a_n, t) = (iq_e/2)\left[\psi(x, a_n, t)\frac{d}{dx}\psi^*(x, a_n, t) - \text{к.с.}\right] \tag{11}$$

для слабого поля $(q_e E_0 a_n) \ll \omega_0(a_n)$ в установившемся режиме при $|x| > a_n$ обращается в нуль, а при $|x| < a_n$ равен

$$E_0 q_e^2 \frac{\Pi}{|U_n|}\omega_0(a_n)\delta\left[\omega - \omega_0(a_n)\right]\cos\omega t. \tag{12}$$

Макроскопический ток $J(x,t)$ при $T = 0$ K может быть вычислен суммированием вкладов от пар состояний, одно из которых (симметричное) ниже уровня Ферми, а второе (антисимметричное) выше.

$$J(x,t) = 2\int_x^\infty J(x, a, t)\rho_s(E_f)\omega_{0f}(a)da. \tag{13}$$

Здесь $\rho_s(E_f)$ — плотность симметричных состояний на уровне Ферми. $J(x,a,t)$ — микроскопический ток, обусловленный переходом электрона из симметричного состояния в антисимметричное состояние вблизи уровня Ферми.

В результате для малых частот находим для проводимости $J(x,t) = \sigma(\omega, x)E_0\cos(\omega t)$:

$$\sigma(\omega, x) = 0 \qquad \text{при} \quad \omega > \omega_{0f}(x) \qquad \text{и}$$

$$\sigma(\omega, x) = \frac{\Pi}{2}\frac{q_e^2}{\hbar}d\frac{\rho(E_f)i\hbar}{(\alpha_f d)^2}\omega \qquad \text{при} \quad [\omega < \omega_{0f}(x)], \tag{14}$$

где $\omega_{0f}(a)$ — разность между антисимметричным и симметричным уровнями, если антисимметричный уровень попадает на уровень Ферми, $\rho(E)$ — плотность состояния для потенциала (2), d — среднее расстояние между ямами, α_f — затухание волновой функции на уровне Ферми.

Проводимость $\sigma(\omega, x)$ согласно (14) оказывается существенно выше проводимости $\sigma(\omega) \sim (\omega\tau)^2[\ln(\omega\tau)]^2$ одномерных пространственно однородных систем (см. [1], с. 167). Это достигается за счет того, что электрон, описываемый волновой функцией (9), может перемещаться за время $2\pi/\omega$ из окрестности точки $x = -a_n$ в окрестность точки $x = +a_n$ и обратно. Причина, конечно же, связана с вырождением исходных состояний и, следовательно, наличием дальних корреляций в системе. Это дает принципиальную возможность электрону в рассматриваемой системе перемещаться с $-\infty$ на $+\infty$, правда, за бесконечно большое время, что невозможно в полностью неупорядоченных системах, где корреляция исчезает в бесконечно удаленных точках.

Отметим, что так же, как и в абсолютно неупорядоченной системе, проводимость при $\omega = 0$ обращается в нуль, однако, значительно медленнее. Это означает, что состояния остаются локализованными.

Наше рассмотрение, очевидно, применимо к гетероструктуре с апериодическими слоями регулярными в плоскости и симметричными относительно плоскости $x = 0$. В такой системе движение в плоскостях $x = 0$ отделяется, а поперечная проводимость описывается теми же формулами.

М.В. Энтин благодарен программе «Университеты России» за финансовую поддержку (грант 3Н-397-93).

Список литературы

[1] И.М. Лифшиц, С.А. Гредескул, Л.А. Пастур. *Введение в теорию неупорядоченных систем* (М., 1982).

[2] З. Флюгге. *Задачи по квантовой механике* (М., 1974) т. 2.

Редактор В.В. Чалдышев

Electron Conductivity of a Disordered System with Mirror Symmetry

A.G.Moiseev and M.V.Entin†

Novosibirsk State Technical University, 630092, Novosibirsk, Russia

† Institute of Semiconductor Physics SB RAS, pr. Lavrentieva, 13, 630090, Novosibirsk, Russia

The electron states in a mirror-symmetric disordered system with the potential $U(x) = -\sum |U_n| [\delta(x+a) + \delta(x-a)]$ is studied. All states are evidenced to be localized. The low frequency conductivity is found to be proportional to the first order of frequency.