УДК 539.211

КВАНТОВАЯ ПОПРАВКА К ПРОВОДИМОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ ИЗ ГЕТЕРОПЕРЕХОДОВ

В. М. Гаспарян, З. А. Касаманян

Предлагается эффективный метод вычисления квантовой поправки к проводимости ($\Delta\sigma$) в неупорядоченной слоистой системе. Исследована зависимость $\Delta\sigma$ неупорядоченной сверхрешетки из гетеропереходов от характерных параметров отдельных ее слоев при отсутствии и при наличии внешнего однородного магнитного поля, направленного по оси сверхрешетки.

Как известно, зависимость сопротивления от магнитного поля и от температуры в неупорядоченных проводниках определяется квантовыми интерференционными эффектами [1]. Квантовая поправка к проводимости $\Delta\sigma$ в квазидвумерном и в трехмерном случаях вычислены в [1, 2], а в пленках произвольной толщины в [3, 4]. В [5, 6] исследовано влияние поверхностной релаксации фазы на эффекты слабой локализации в проводящей пленке и в тонкопленочной гетероструктуре, что может дать важную информацию о процессах рассеяния электронов на границах.

В работе развивается метод для вычисления локализационных квантовых поправок к проводимости в гетероструктурах в слоистых системах, состоящих из чередующихся гетеропереходов. Для этой цели удобным является метод квазиодномерных контактных ФГ, развитый в [7-9], для исследования энергетического спектра электронов в системах, включающих границы раздела различных кристаллов. В этом методе функция Грина (ФГ) слоистой системы в каждом n-м слое $G^{(n)}$ выражается явно через ФГ G_n отдельных не взаимодействующих и не ограниченных со всех сторон подсистем. Это позволяет с помощью известных ФГ объемной задачи отдельных подсистем явно вычислить ФГ слоистой системы, тем самым решать задачу о нахождении энергетического спектра и волновых функций электрона в слоистой структуре.

В задаче о «купероне» — двухчастичной ФГ, с которым связана локализационная квантовая поправка к проводимости трехмерного образца, в слоистых системах вопрос можно ставить и решить аналогичным образом. При этом необходимо иметь в виду следующие обстоятельства. В теории энергетического спектра и рассеяния электронов в слоистых системах сшиваются ФГ и их производные на границах раздела. Для одномерной системы, где в области $z < z_1$ имеем подсистему I, а в области $z > z_1$ — подсистему II, условия сшивания имеют следующий вид [9]

$$G_{\rm I}(z_1, z_1) = G_{\rm II}(z_1, z_1),$$
$$\frac{\partial}{\partial z_1} G_{\rm I}(z_1, z_1) = \frac{\partial}{\partial z_1} G_{\rm II}(z_1, z_1),$$

где $G_{\rm I}(z, z')$ и $G_{\rm II}(z, z')$ — квазиодномерные ФГ в соответствующих областях. В задаче о купероне мы имеем [5]

$$C_{\rm I}(z_1, z_1) = C_{\rm II}(z_1, z_1),$$
$$\frac{\partial}{\partial z_1} D_1 C_{\rm I}(z_1, z_1) = \frac{\partial}{\partial z_1} D_2 C_{\rm II}(z_1, z_1),$$

где $D_{1,2}$ — коэффициент диффузии электрона в соответствующей области.

Расчеты показывают, что такое изменение условий сшивания на границах раздела оставляет неизменными окончательные результаты. Это означает, что в задачах о купероне можно воспользоваться вычисленными ФГ электрона в слоистых системах.

Для вычисления квантовой поправки к проводимости в неупорядоченной сверхрешетке из гетеропереходов необходимо вкратце изложить здесь основные результаты из теории квазиодномерных контактных ФГ для электрона в слоистой системе.

1. Контактная ФГ и локальная плотность состояний

Квазиодномерную ФГ в n-й подсистеме мы определим уравнением ($\hbar=1$)

$$\left(E-\frac{\mathbf{q}^2}{2m_n}+\frac{1}{2m_n}\frac{\partial^2}{\partial z^2}-V_n(z)\right)G_n(z,\ z')=-\delta(z-z'), \tag{1}$$

где $V_n(z)$ — потенциальная энергия электрона, а одномерные координаты z, z' меняются в неограниченных пределах. Квазиодномерная контактная ФГ $G^{(n)}(z, z')$ в n-м слое слоистой структуры определяется тем же уравнением (1), но пределы изменения z, z' ограничены условиями $z_{n-1}\leqslant z, z'\leqslant z_n$. Здесь в каждом слое необходимо написать соответствующее уравнение, затем сшить ФГ и их производные на границах. Естественно, что ФГ $G^{(n)}(z, z')$ отличаются от ФГ $G_n(z, z')$. Будем считать, что решение уравнения для объемной задачи, т. е. ФГ $G_n(z, z')$ в каждой подсистеме известны.

Локальная плотность состояний квазиодномерной системы, зависящая от двумерного волнового вектора $\mathbf{q}$ как от параметра, выражается через ФГ контактной задачи формулой

$$\rho_n(E\mathbf{q})=\frac{1}{d_n}\int\limits_{z_{n-1}}^{z_n}dz\,\mathrm{Im}\,G^{(n)}(z,\ z;\ E-\mathbf{q}^2), \tag{2}$$

где $d_n=z_n-z_{n-1}$ — толщина n-го слоя слоистой системы, состоящей из произвольного числа контактирующих плоских слоев; $G^{(n)}(z, z')$ — контактная ФГ электрона в n-м слое выражается через ФГ электрона $G_n(z, z')$ в соответствующей подсистеме и амплитуд отражения электрона, зависящих практически от ФГ всех подсистем на границах z_{n-1} и z_n. Явные выражения для этих амплитуд зависят от конкретной структуры и в общем случае их можно выразить с помощью детерминантов. В частном случае двух и трех контактирующих подсистем формулы для этих амплитуд получены в [9], а в сверхрешетке из гетеропереходов в — [10].

Энергетический спектр слоистой системы определяется полюсом этих амплитуд. Мы намеренно не выписываем выражения для этих амплитуд в конкретных случаях, поскольку нас здесь интересует вычисление локальной плотности состояний $\rho_n(E, \mathbf{q})$, которая выражается через интеграл [9]. Достоинство излагаемого здесь метода заключается в том, что интеграл, фигурирующий в (2), можно вычислить в общем виде [11].

В итоге можно получить формулу типа

$$\rho_n(E,\ \mathbf{q})=\frac{1}{d_n}\,\mathrm{Im}\,\frac{\partial}{\partial E}\left[\ln\Phi_N(E,\ \mathbf{q})\right]_n, \tag{3}$$

где N — число слоев в системе, индекс n указывает, что производная берется по энергии от параметров соответствующей подсистемы. Функция $\Phi_N(E, \mathbf{q})$ фактически определяет энергетический спектр слоистой системы с помощью уравнения

$$\Phi_N(E,\ \mathbf{q})=0. \tag{4}$$

Явное выражение для этой функции можно получить в каждом конкретном случае. Примечательно, что определение явного вида этой функции с точки зрения объема вычислений несравненно более легкая задача, чем нахождение явного вида ФГ. Более того, структура правой части (3) такова, что можно в общем виде вычислить трехмерную плотность состояний всей системы ($d=\sum_n d_n$)

$$\rho(E)=\frac{1}{d}\sum_n d_n \int \rho_n(E,\ \mathrm{q})\,d\mathrm{q}=\frac{1}{d}\,\mathrm{Im}\ln\Phi_N(E-\mathrm{q}^2)\Big|_0^\infty. \tag{5}$$

Например, в сверхрешетке из гетеропереходов функция $\Phi_N(E-\mathrm{q}^2)$ имеет вид [10] (при $\partial/\partial z_j\, G_j(z_j,\ z_j)=0$)

$$\Phi_N=\cos kd-\left[\cos k_1d_1\cos k_2d_2-\frac{1}{2}\left(\frac{G_1}{G_2}+\frac{G_2}{G_1}\right)\sin k_1d_1\sin k_2d_2\right], \tag{6}$$

где G_1, G_2 — ФГ отдельных подсистем, составляющих сверхрешетку из гетеропереходов, d_1 и d_2 — толщины соответствующих слоев, $d=d_1+d_2$,

$$k_j=\sqrt{2m_jE-\mathrm{q}^2},\quad (j=1,\ 2),$$

m_j — эффективные массы электрона, k — квазиволновое число электрона в сверхрешетке, от которого зависит энергия.

Локальные плотности состояний в отдельных слоях сверхрешетки имеют вид [10]

$$\rho_{\mathrm{I}}(E_0\mathrm{q})=\frac{1}{d_1\pi}\,\mathrm{Re}\left(\frac{dk}{dE}\right)_1,\quad \rho_{\mathrm{II}}(E,\ \mathrm{q})=\frac{1}{d_2\pi}\,\mathrm{Re}\left(\frac{dk}{dE}\right)_2, \tag{7}$$

где индексы 1 и 2 указывают, что производная от квазиволнового числа берется по энергии от параметров соответствующей подсистемы.

Таким образом, для вычисления локальной плотности состояний в сверхрешетке из гетеропереходов достаточно знания явного вида функции Φ_N.

2. Куперон в слоистой системе и квантовая поправка к проводимости

Локализационные квантовые поправки к проводимости трехмерного образца дается формулой [12]

$$\Delta\sigma(\omega,\ T)=-\frac{e^2D}{\pi L}\int_0^{1/l}\frac{qdq}{2\pi}\int_{-L}^{L}C(z,\ z;\ \varkappa)\,dz, \tag{8}$$

где τ_φ — время релаксации фазы волновой функции из-за неупругого или спин-спинового рассеяния, l — длина свободного пробега, q — двумерный волновой вектор в плоскости xoy, $2L$ — длина образца, C — квазиодномерный куперон (QC), определяемый уравнением

$$\left(-i\omega+D\mathrm{q}^2+\frac{1}{\tau_\varphi}-D\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)C(z,\ z';\ \varkappa)=\delta(z-z'). \tag{9}$$

Здесь $\varkappa^2=q^2+L_\varphi^{-2}-\frac{i\omega}{D}$, $L_\varphi=[D\tau_\varphi]^{1/2}$, ω — частота внешнего поля. В правой части (8) входит куперон при совпадающих одномерных координатах $z=z'$. В пространственно-однородной системе эта функция не зависит от координаты. В гетероструктурах и слоистых системах, где в различных частях D и τ_φ могут отличаться, ситуация, естественно, меняется. Здесь QC при совпадающих координатах уже зависит от координат, а квантовые поправки к проводимости получаются усреднением по координате z, как это явно указано в (8).

Пусть имеется слоистая неупорядоченная система, состоящая из N взаимодействующих слоев. Для квантовой поправки к проводимости в n-м слое в отсутствие магнитного поля имеем ($z_{n-1}<z<z_n$)

$$\Delta\sigma_n(\omega, T) = -\frac{2e^2D_n}{\pi d_n}\int\frac{qdq}{2\pi}\int\limits_{z_{n-1}}^{z_n} C^{(n)}(z, z_j\varkappa_n)\,dz, \tag{10}$$

где D_n, τ_{φ_n} — характерные параметры n-й подсистемы; $C^{(n)}(z, z)$ QC — в n-м слое слоистой системы;

$$\varkappa_n^2 = q^2 + L_{\varphi_n}^{-2} - i\omega/D_n.$$

По аналогии с ФГ введем здесь QC для n-й подсистемы, удовлетворяющий уравнению ($-\infty < z, z' < \infty$)

$$\left(-i\omega + D_n q^2 + \frac{1}{\tau_{\varphi_n}} - D_n\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)C_n(z, z'_j\varkappa_n) = \delta(z - z'), \tag{11}$$

а также контактный QC $C^{(n)}(z, z')$, удовлетворяющий тому же уравнению (9), но z, z' меняются в пределах $z_{n-1} \leqslant z, z' \leqslant z_n$.

Для всей слоистой системы необходимо рассмотреть систему уравнений (11) с $n=1, 2, \ldots N$ и необходимые условия сшивания этих функций и их производных на границах [5].

Как видим, формулировка задачи о купероне в слоистой системе аналогична задаче электрона в квазиодномерной системе. Из сравнения уравнений (1) и (11) заключаем, что контактный QC получится из контактной ФГ заменой

$$\frac{1}{2m_*} \to D_n \quad \text{и} \quad E \to i\omega - \frac{1}{\tau_{\varphi_n}}. \tag{12}$$

Далее из сравнения формул (2) и (10) видим, что квантовая поправка к проводимости выражается через локальную плотность состояний, где произведена соответствующая замена, указанная в (12),

$$\Delta\sigma_n(\omega, T) = -\frac{e^2D_n}{\pi d_n}\int qdq\rho_n(E, q)\Big|_{E=i\omega-1/\tau_{\varphi_n}}. \tag{13}$$

Квантовую поправку к проводимости в сверхрешетке без магнитного поля с учетом (13) можно представить в виде

$$d\Delta\sigma(\omega, T) = d_1\Delta\sigma_1(\omega, T) + d_2\Delta\sigma_2(\omega, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2}\,\mathrm{Re\,Arch}\,\varkappa, \tag{14}$$

где $\varkappa$ определяется из формулы

$$\mathrm{ch}\,\varkappa(d_1 + d_2) = \mathrm{ch}\,\varkappa_1 d_1\,\mathrm{ch}\,\varkappa_2 d_2 + \frac{1}{2}\left(\frac{C_1}{C_2} + \frac{C_2}{C_1}\right)\mathrm{sh}\,\varkappa_1 d_1\,\mathrm{sh}\,\varkappa_2 d_2,$$

получаемой из (6) заменой $k=i\varkappa$, $k_1=i\varkappa_1$, $k_2=i\varkappa_2$. Объемный QC имеет вид

$$C_j = 1/2\varkappa_j D_j, \quad \varkappa_j^2 = q^2 + L_{\varphi_j}^{-2} - i\omega/D_j.$$

В правой части (14) необходимо подставлять пределы интегрирования. Строго говоря, интегрирование по q в (14) проводится в пределах $(0, \infty)$. Однако, как и в случае одной пленки, на верхнем пределе возникает расходимость [13], которая обрезается на длине свободного пробега l ($q_{\max} \sim l^{-1}$). В нашем случае возникает логарифмическая расходимость, присущая квазидвумерным системам, и образование на верхнем пределе интегрирования можно провести аналогичным образом. Однако в различных частях слоистой структуры длины свободного пробега вдоль плоскостей раздела могут быть различными. Поскольку локальная проводимость в n-м слое получается интегрированием QC в пределах данного слоя (см. (10)), где длина свободного пробега есть l_n, естественно в QC n-го слоя верхний предел $q_{\max}$ считать l_n^{-1}. Тогда ($\omega=0$)

$$\Delta\sigma(0, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln \frac{\varphi\left(\frac{d_1}{l_1}, \frac{d_2}{l_2}, \alpha\right) + \left[\varphi^2\left(\frac{d_1}{l_1}, \frac{d_2}{l_2}, \alpha\right) - 1\right]^{1/2}}{\varphi\left(\frac{d_1}{L_1}, \frac{d_2}{L_2}, \alpha\right) + \left[\varphi^2\left(\frac{d_1}{L_1}, \frac{d_2}{L_2}, \alpha\right) - 1\right]^{1/2}}, \tag{15}$$

$$\varphi(x, y, \alpha) = \operatorname{ch} x \operatorname{ch} y + \frac{1}{2}\left(\frac{y\alpha}{x} + \frac{x}{y\alpha}\right) \operatorname{sh} x \operatorname{sh} y, \quad \alpha = \frac{D_2 d_1}{D_1 d_2}.$$

Нетрудно убедиться, что при $D_1 = D_2$; $\tau_{\varphi_1} = \tau_{\varphi_2}$ (пространственно-однородная в среднем система) получается результат работы [2], а при $d_2 \to \infty$, $D_2 \to 0$ (или $d_1 \to \infty$, $D_1 \to 0$) имеем результат для пленки произвольной толщины со свободными поверхностями, исследованной в [3].

Полученная общая формула (15) для квантовой поправки к проводимости имеет сложный вид, поэтому имеет смысл несколько упростить формулу и перейти к модели сверхрешетки, состоящей из чередующихся пленок одного сорта, разделенными между собой субатомными слоями другого вещества: $d_2 \to 0$, $\tau_{\varphi_2} \to 0$, но $S \equiv \frac{d_2}{t_{\varphi_2}} = \text{const}$. Здесь S имеет смысл скорости поверхностной релаксации. В этом случае имеем (далее в формулах пропускается индекс 1)

$$\Delta\sigma(0, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \ln \frac{\varphi_0\left(\frac{d}{l}\right) + \left[\varphi_0^2\left(\frac{d}{l}\right) - 1\right]^{1/2}}{\varphi_0\left(\frac{d}{l}\right) + \left[\varphi_0^2\left(\frac{d}{l}\right) - 1\right]^{1/2}}, \tag{16}$$

$$\varphi_0(x) = \operatorname{ch} x + \frac{1}{2} \frac{Sd}{xD} \operatorname{sh} x. \tag{17}$$

В рассмотренной нами ситуации $d > l$ и

$$\varphi_0(d/l) \approx \operatorname{ch} d/l,$$

поскольку $S \ll D/l \sim V_F$, где V_F — фермиевская скорость. Из (15)—(17) видно, что, если $d \ll L_\varphi$, то зависимость квантовой поправки к проводимости от температуры T и толщины d имеет вид

$$\Delta\sigma(0, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2}\left\{\frac{d}{l} - \ln\left[\frac{d^2}{2L_\varphi^{*2}} + \sqrt{\left(\frac{d^2}{2L_\varphi^{*2}}\right)^2 - 1}\right]\right\}. \tag{18}$$

$$L^*(T) = \sqrt{D\tau^*}, \quad \tau^{*-1} = \tau_\varphi^{-1} + \tau_f^{-1}; \quad \tau_f = \frac{d^2}{2D} + \frac{d}{S}.$$

В пределе сильной поверхностной релаксации, когда

$$\frac{d}{L_\varphi} \operatorname{cth} \frac{d}{L_\varphi} < \frac{Sd}{2D},$$

для поправки к проводимости имеем

$$\Delta\sigma(0, T) = -\frac{e^2}{2\pi^2}\left\{\frac{d}{l} - \ln\left[\frac{1}{2}\frac{SL_\varphi}{D} \operatorname{sh} \frac{d}{L_\varphi} + \sqrt{\left(\frac{SL_\varphi}{2D} \operatorname{sh} \frac{d}{L_\varphi}\right)^2 - 1}\right]\right\}.$$

При наличии магнитного поля, направленного по оси сверхрешетки $H = H_z$, квантовая поправка к проводимости получается из формулы, аналогичной (8), где вместо интегрирования по $\mathbf{q}$ идет суммирование по дискретным магнитным квантовым числам n. Это позволяет сразу написать формулу для $\Delta\sigma(H, T)$ в виде

$$\Delta\sigma(H, T) = -\frac{e^2}{\pi^2 r_H^2} \sum_{n=0} \frac{1}{\varkappa} \frac{\partial}{\partial \varkappa} \operatorname{Arch}\left[\operatorname{ch} \varkappa_1 d_1 \operatorname{ch} \varkappa_2 d_2 + \frac{C_1^2 + C_2^2}{2C_1 C_2} \operatorname{sh} \varkappa_1 d_1 \operatorname{sh} \varkappa_2 d_2\right], \tag{19}$$

$$C_j = \frac{1}{2D_j \varkappa_j}, \quad \varkappa_j^2 = \frac{2}{r_H^2}(2n+1) + L_\varphi^{-2}, \quad r_H^2 = \frac{\hbar c}{eH}.$$

При $d_2 \to 0$, $\tau_{\varphi_2} \to 0$, но $S \equiv \frac{d_2}{\tau_{\varphi_2}} = \mathrm{const}$, из (19) получаем

$$\Delta\sigma(H, T) = -\frac{e^2}{\pi^2 r_H^2} \sum_{n=0} \frac{1}{\varkappa} \frac{\partial}{\partial \varkappa} \operatorname{Arch} \varphi(\varkappa d),$$

где φ определяется соотношением (17).

Авторы выражают благодарность Б. Л. Альтшулеру и А. Г. Аронову за многократные и полезные обсуждения.

Литература

[1] *Altshuler B. L., Larkin A. I., Lee P. A., Khmelnitzkii D. E.* Phys. Rev. B, 1980, vol. 22, N 11, p. 5142—5153.
[2] *Kawabata A.* J. Phys. Soc. Japan, 1980, vol. 49, N 2, p. 628—637.
[3] *Волков В. А.* Письма в ЖЭТФ, 1982, т. 36, № 11, с. 394—396.
[4] *Gasparian V. M.* Sol. St. Commun., 1985, vol. 58, N 11, p. 783—784.
[5] *Гаспарян В. М., Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г.* ФТТ, 1987, т. 29, № 9, с. 2671—2677.
[6] *Гаспарян В. М.* ФНТ, 1987, т. 13, № 12, с. 1229—1231.
[7] *Garcia—Moliner F., Rubia J.* J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1969, vol. 2, N 2, p. 1789—1796.
[8] *Velický B., Bartoš I.* J. Phys. C: Sol. St. Phys., 1971, vol. 4, N 7, p. L104—L107.
[9] *Касаманян З. А., Ювбашян Э. С.* Уч. зап. ЕрГУ, 1977, № 3, с. 43—46.
[10] *Касаманян З. А., Ювбашян Э. С.* Уч. зап. ЕрГУ, 1980, № 2, с. 65—72; *Kasamanian Z. H., Yuezbashyan E. S.* Phys. St. Sol. (b), 1980, vol. 97, N 1, p. K149—K152.
[11] *Касаманян З. А.* Изв. вузов, физика, 1981, № 6, с. 50—55.
[12] *Альтшулер Б. Л., Аронов А. Г., Ларкин А. И., Хмельницкий Д. Е.* ЖЭТФ, 1981, т. 81, № 2 (8), с. 768—783.
[13] *Altshuler B. L., Aronov A. G., Khmelnitzkii D. E., Larkin A. I.* In Quantum Theory of Solids, edited by I. M. Lifshits. Moscow: Mir, 1982. 130 p.

Ереванский политехнический
институт им. К. Маркса
Ереван

Поступило в Редакцию
21 декабря 1987 г.