

СОПРОТИВЛЕНИЕ ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ ИЗ ПЕРИОДИЧЕСКИ РАСПОЛОЖЕННЫХ СЛУЧАЙНЫХ δ -ПОТЕНЦИАЛОВ. II

Д.М. СЕДРАКЯН, Д.А. БАДАЛЯН, В.М. ГАСПАРЯН

Ереванский государственный университет

А.Ж. ХАЧАТРЯН

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 29 ноября 1995г.)

В работе предложен метод решения уравнения для среднего сопротивления, полученного авторами в работе [1]. Получена аналитическая зависимость среднего сопротивления от параметров задачи в общем случае. Показано, что зависимость $\langle \rho_L \rangle$ от длины цепочки при неограниченном росте числа рассеивающих центров становится показательной функцией, т.е. имеет место локализация электронов. Найдена зависимость радиуса локализации одноэлектронных состояний от энергии падающего электрона и параметра беспорядка цепочки.

1. Решение уравнения для $\langle \rho_N \rangle$

Как было показано в работе [1], среднее сопротивление цепочки из периодически расположенных случайных короткодействующих рассеивателей удовлетворяет следующему конечно-разностному уравнению:

$$\langle \rho_N \rangle = N\alpha + \sum_{n=1}^{N-1} C_{N-n} \langle \rho_n \rangle, \quad \rho_1 = \alpha, \quad (1)$$

где

$$C_n = 2\alpha(1 - \cos 2ka \cdot n) \quad \text{и} \quad \alpha = \frac{\langle V_j^2 \rangle}{4k^2}.$$

Здесь $E = k^2$ ($\hbar = 2m_0 = 1$) энергия электрона, $\langle V_j^2 \rangle$ - среднее квадратичное значение потенциала одиночного примесного барьера, a - период цепочки.

Ищем решение уравнения (1) в виде

$$\langle \rho_N \rangle = \sum_{j=1}^p A_j x_j^N + A_0 \quad (2)$$

Здесь, как мы покажем, x_j являются корнями некоторого характеристического уравнения, где p определяет число его корней. Неизвестные коэффициенты A_0, A_j предполагаются не зависящими от N . Подставляя (2) в (1) и требуя, чтобы оно удовлетворялось для произвольного N , получим следующие уравнения, определяющие p, x_j, A_0, A_j :

$$\sum_{j=1}^p A_j x_j = \frac{1}{2} + \alpha \quad , \quad (3)$$

$$\sum_{j=1}^p \frac{A_j}{1+x_j} = \frac{1-\alpha}{4} \quad , \quad (4)$$

$$\sum_{j=1}^p A_j = \frac{1}{2} \quad , \quad (5)$$

$$A_0 = -\frac{1}{2} \quad (6)$$

Характеристическое уравнение, определяющее x_j , является кубическим уравнением (т.е. $p = 3$) и имеет вид:

$$x^3 - x^2(l+m) + x(l-m) - 1 = 0 \quad , \quad (7)$$

$$\text{где } l = 1 + 2\cos 2ka; \quad m = 2\alpha(1 - \cos 2ka) \quad (7a)$$

Совместное решение (3)-(5) с использованием (7) дает:

$$A_1 = \frac{1}{2} \frac{(1-\alpha)(1+l) - (1+x_1)(l+m-x_1-2\alpha)}{(x_2-x_1)(x_3-x_1)} \quad , \quad (8)$$

остальные два коэффициента A_2, A_3 получаются циклической перестановкой букв x_1, x_2, x_3 в (8).

Таким образом, согласно (7)-(8), зависимость среднего сопротивления $\langle \rho_L \rangle$ от длины цепочки $L = Na$ (a - период цепочки) в общем случае выражается суммой трех показательных функций x_j^N с коэффициентами A_1, A_2, A_3 , которые сами зависят от корней характеристического уравнения (7).

Корни кубического уравнения (7) в общем случае выражаются через радикалы:

$$x_1 = A + B, \quad x_2, x_3 = -\frac{A+B}{2} \pm i \frac{A-B}{2} \sqrt{3};$$

$$\text{где } A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}}, \quad B = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}}, \quad (9)$$

$$Q = \frac{2l}{3} \frac{l^2 + 3m^2}{9} - \frac{1}{12} \left(\frac{l^2 - m^2}{3} \right)^2 - \frac{l^2 - m^2}{6} + \frac{1}{4}, \quad (10)$$

$$q = -2 \left(\frac{l-m}{3} \right)^3 + \frac{l^2 - m^2}{3} - 1$$

Имея решение (2) и характеристическое уравнение (7), мы легко можем записать рекуррентное уравнение для $\langle \rho_N \rangle$:

$$\langle \rho_N \rangle = (l+m) \langle \rho_{N-1} \rangle - (l-m) \langle \rho_{N-2} \rangle + \langle \rho_{N-3} \rangle + m \quad (N \geq 4) \quad (11)$$

где начальные условия $\langle \rho_1 \rangle$, $\langle \rho_2 \rangle$, $\langle \rho_3 \rangle$ легко получаются из (1):

$$\langle \rho_1 \rangle = \alpha, \quad \langle \rho_2 \rangle = 2\alpha + 2\alpha^2(1 - \cos 2ka),$$

$$\langle \rho_3 \rangle = 3\alpha + 2\alpha^2(3 - 2\cos 2ka - \cos 4ka) + 2\alpha^3(1 - \cos 2ka)^2$$

Рекуррентное уравнение (11) удобно для численных расчетов и для исследования $\langle \rho_N \rangle$ для небольших N .

2. Анализ решений характеристического уравнения

Прежде чем рассмотреть решение (2) в предельном случае $L \rightarrow \infty$, выясним некоторые свойства корней характеристического уравнения (7). Для этого запишем (7) в следующем виде:

$$l = \frac{x^2 + x + 1}{x} - \frac{x+1}{x-1} m \quad (12)$$

Будем рассматривать l и m как линейно зависимые переменные, а корень x характеристического уравнения (7), как некий независимый параметр уравнения (12). Как видно из определения l и m (7а), области принимаемых ими значений ограничены, для произвольно

заданных ka и α ($\alpha \geq 0$ по определению) они принимают численные значения только в интервалах

$$l \in [-1, 3], \quad \text{и} \quad m \in [0, \infty[\quad (13)$$

Можно показать, что только для определенных x уравнение (12), которое на плоскости (m, l) выглядит, как прямая линия, имеет пересечение с областью определения переменных l и m (13). Поэтому корни уравнения (7) имеют такие численные значения, для которых прямая (12) и область (13) пересекаются. Можно показать, что данное пересечение имеет место только тогда, когда x принимает значение в интервалах

$$x \in [-1, 0[\quad \text{и} \quad [1, \infty[\quad (14)$$

Следовательно, для произвольных ka и α действительный корень характеристического уравнения (7) принимает значения только в интервалах (14).

Рассмотрим случай, когда (7) имеет один действительный и два комплексных корня. Это имеет место, когда $Q > 0$ (10). Комплексные корни (7) всегда можно представить в виде

$$x_2 = \rho e^{i\varphi} \quad \text{и} \quad x_3 = \rho e^{-i\varphi}, \quad \text{т.е.} \quad x_2 = x_3^* \quad (15)$$

где ρ и φ - действительные числа.

По теореме Виетта, произведение корней (7) дает

$$x_1 x_2 x_3 = 1 \quad (16)$$

где x_1 - действительный корень (7). Подставляя (15) в (16) имеем:

$$x_1 \rho^2 = 1 \quad (17)$$

Так как по определению ρ действительно (15) и, следовательно, $\rho^2 > 0$, то единственный действительный корень x_1 уравнения (7) принимает значение в интервале

$$x_1 \in]1, \infty[\quad (18)$$

и, как следует из (17), ρ принимает значение:

$$\rho \in]0, 1[\quad (19)$$

Действительный корень x_1 выражается формулой

$$x_1 = A + B, \quad (20)$$

где A и B определяются по формулам (9), (10).

Проведем аналогичный анализ для случая $Q \leq 0$ (10), т.е. когда уравнение (7) имеет три действительных корня. Как видно из (16), все корни (7) одновременно не могут иметь значения в интервале $]1, \infty[$, т.к. в данном случае их произведение будет больше единицы. Случай, когда все три корня равны единице, соответствует краю зоны $ka = \pi$ и является особенностью данной модели (9). Невозможен случай, когда один корень принимает значение в интервале $[-1, 0[$, а два других корня - в интервале $]1, \infty[$, т.к. в этом случае произведение корней отрицательно, что также противоречит условию (16). Единственно возможный вариант одновременного удовлетворения условиям (14) и (16), это когда

$$x_1 \in [1, \infty[\quad (21)$$

и

$$x_2, x_3 \in [-1, 0[\quad (22)$$

Действительный корень x_1 (21), в данном случае с $Q \leq 0$ (10), определяется по формуле

$$x_1 = -\frac{A+B}{2} + i \frac{A-B}{2} \sqrt{3}; \quad (23)$$

здесь $A = B^*$ и определяются по формулам (9), (10).

Свойства корней уравнения (7), полученные в этом параграфе, будут использованы для исследования характера локализации одноэлектронных состояний.

3. Локализация одноэлектронных состояний. Радиус локализации

Как отмечалось выше, локализация одноэлектронных состояний в одномерной неупорядоченной структуре определяется поведением среднего ландауэрского сопротивления в предельном случае $L \rightarrow \infty$. Рассмотрение решения (2) с использованием



(18), (19), (21), (22) в предельном случае $L \rightarrow \infty$ делает возможным следующее утверждение общего характера: асимптотическое поведение ландауэрского сопротивления не зависит от энергии падающего электрона и параметра беспорядка цепочки и имеет вид:

$$\langle \rho_L \rangle \approx \exp L/\xi, \quad (24)$$

где ξ зависит от энергии электрона и параметра беспорядка цепочки и не зависит от длины L неупорядоченной структуры. Исключением является только случай, когда энергия электрона соответствует краю энергетической зоны ($ka = \pi$). В этом случае радиус локализации $\xi \rightarrow \infty$, и состояние является делокализованным.

Рассмотрим решение (2) для $Q > 0$ (10), т.е. когда характеристическое уравнение (7) имеет один действительный корень x_1 (20) и два комплексно-сопряженных корня (15). Тогда, как видно из (8), $A_2 = A_3^*$, решение (2) можно записать в виде

$$\langle \rho_N \rangle = A_1 x_1^N + 2a \rho^N \cos(\phi N + \phi) - \frac{1}{2} \quad (25)$$

Здесь коэффициенты A_2 и A_3 представлены в виде

$$A_2 = ae^{\phi} \quad \text{и} \quad A_3 = ae^{-\phi}$$

Как было показано в п.2, при условии $Q > 0$, $\rho \in]0, 1[$ и $x_1 > 1$ (18), (19). Следовательно, (2) при $N \rightarrow \infty$ имеет вид:

$$\langle \rho_N \rangle = A_1 x_1^N - \frac{1}{2}, \quad (26)$$

где x_1 определяется по формуле (20). Здесь мы учли, что амплитуда осциллирующего члена (25) при $N \rightarrow \infty$ стремится к нулю. Сравнивая решение (26) с (24), для радиуса локализации получим

$$\xi = \frac{a}{\ln x_1}, \quad (27)$$

где x_1 определяется по формуле (20), и как было показано в п.2, он всегда больше единицы и зависит только от энергии электрона и параметра беспорядка цепочки.

В случае $Q \leq 0$ (10), т.е. когда характеристическое уравнение (7) имеет три действительных корня, решение (2) при $N \rightarrow \infty$ снова принимает вид (24), где x_1 определяется по формуле (23), а радиус локализации - формулой (27).

Таким образом, мы показали, что радиус локализации в общем случае выражается через положительный корень уравнения (7), который всегда больше единицы ($ka \neq \pi$). Как видно из (27), когда x_1 становится больше числа 1, радиус локализации $\xi < a$. Строго говоря, данный результат является формальным. Действительно, получается $\xi < a$, в то время как между примесными центрами имеет место свободное движение электрона. Следовательно, полученный результат следует интерпретировать не как $\xi < a$, а как слабую проницаемость одиночного примесного барьера.

Как видно из (20) и (23), корень x_1 в (27) представляет из себя сложное выражение с радикалами, и выяснение характера локализации в общем случае требует выполнения численного расчета. Рассмотрим частные случаи, когда энергия электрона соответствует краям

$$ka = \pi + \pi m, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

и центру ($ka = \frac{\pi}{2} + \pi m$) энергетической зоны, а параметр беспорядка W произволен.

При $ka = \pi$ величина Q (10), определяющая характер корней уравнения (7), равняется нулю для любого W , и для корней уравнения (7) имеем $x_1 = x_2 = x_3 = 1$. Как видно из (27), в этом случае $\xi \rightarrow \infty$ и состояние является делокализованным. Как видно из (8), коэффициенты A_1, A_2, A_3 в решении (2) стремятся к бесконечности, и получение зависимости $\langle \rho_N \rangle$ от N осуществляется с помощью соответствующих предельных переходов. Из (2) можно показать, что для $ka = \pi$ $\langle \rho_N \rangle$ имеет вид

$$\langle \rho_N \rangle = N\alpha \quad (28)$$

что совпадает с известным результатом для резонансного прохождения [2]. Но когда энергия электрона близка к краям зоны ($ka = \pi + \pi m$, $m = 0, 1, 2, \dots$), зависимость $\langle \rho_N \rangle$ от N имеет осцилляционный характер. Данный результат численно был получен в работе Азбеля [3].

Рассмотрим решение (2), когда энергия электрона соответствует центру зоны ($ka = \frac{\pi}{2}$). В этом случае одно из решений

(7) дает $x_3 = -1$, а два других определяются из уравнения

$$x^2 - 4\alpha - 1 = 0 \quad (29)$$

Корни этого уравнения имеют вид

$$x_{1,2} = a \pm b,$$

где $a = 2\alpha$ и $b = \sqrt{1 + 4\alpha^2}$. Подставляя (29) в (2), получим

$$\langle \rho_N \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{(a+b)^N + (a-b)^N}{2} + \frac{(a+b)^N - (a-b)^N}{2b} - 1 \right) \quad (30)$$

При получении (30) мы учли, что коэффициент A_3 , соответствующий корню $x_3 = -1$, равен нулю. Как видно из (29), x_1 всегда больше единицы, а x_2 по модулю всегда меньше единицы, поэтому функция x_2^N в (30), осциллируя, стремится к нулю. Из (30) следует, что радиус локализации ξ в случае $ka = \frac{\pi}{2}$ имеет вид

$$\xi = \frac{a}{\ln(2\alpha + \sqrt{1 + (2\alpha)^2})} \quad (31)$$

Представляет интерес также нахождение зависимости радиуса локализации от энергии электрона в случаях слабого и сильного рассеяния.

Рассмотрим случай слабого рассеяния, т.е. $\alpha \ll 1$. Как показано в п.2, уравнение (7) всегда имеет корень больший единицы,

и именно он определяет радиус локализации (27). Будем искать решение (7) в виде

$$x = 1 + \Delta x, \quad \Delta x > 0. \quad (32)$$

Подставляя (32) в (7) и оставляя только члены, линейные по α , для Δx получим:

$$\Delta x = \frac{2m}{3-l} = 2\alpha \quad (33)$$

Подставляя (33) в (32), из (27) для ξ следует:

$$\xi = \frac{a}{\ln(1+2\alpha)} \quad (34)$$

Разлагая (34) в ряд Тейлора, окончательно получим:

$$\xi = \frac{2ak^2}{\langle V_j^2 \rangle} \quad (35)$$

Здесь ξ в два раза больше радиуса локализации, полученного в работе [4]. Это связано с тем, что в [4] радиус локализации находился из $\langle \ln \rho \rangle$, который при $\alpha \ll 1$ связан с $\ln \rho$ соотношением [5]

$$\ln \langle \rho \rangle = 2 \langle \ln \rho \rangle$$

В случае сильного взаимодействия $\alpha \gg 1$ и условия

$$\langle V_j^2 \rangle \frac{\sin^2 ka}{4k^2} \gg 1 \quad (36)$$

радиус локализации выражается простой формулой:

$$\xi = \frac{a}{\ln \left(\langle V_j^2 \rangle \frac{\sin^2 ka}{k^2} \right)} \quad (37)$$

Результат (37) был получен в работе [6] при условии $\alpha \gg 1$. Но как показывает наше рассмотрение, предположение $\alpha \gg 1$ не достаточно для получения (37): необходимо выполнение условия (36).

Научные результаты, приведенные в этой статье, были получены, в частности, благодаря Гранту N° 14VL000 Международного Научного Фонда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Д.М. Седракий, Д.А. Бадалян, В.М. Гаспарян, А.Ж. Хачатрян.
Изв. НАН Армении, Физика, 31, 7 (1996).
2. V.M. Gasparian, B.L. Altshuler, A.G. Aronov, Z.A. Kasamianian.
Phys. Lett., A132, 201 (1988).
3. M.Ya. Azbel. Phys. Rev., B27, 3901 (1983).
4. В.И. Перель, Д.И. Поляков. ЖЭТФ, 86, 352 (1984).
5. B. Kramer, Localization and..., Preprint PTB, 1988.
6. V.M. Gasparian, Ash.Gh. Khachatrian. Solid State Commun., 12, 1061 (1993).

RESISTANCE OF A ONE-DIMENSIONAL CHAIN OF PERIODICALLY ARRANGED RANDOM δ -SCATTERERS. II.

D.M. SEDRAKIAN, D.A. BADALIAN, V.M. GASPARIAN, ASH.GH. KHACHATRIAN

A method of solution of the equation for average resistance is offered. The analytical dependence of the average resistance on the parameters of the problem is obtained in general case. It is shown that the dependence of $\langle \rho \rangle$ on the length L of the chain becomes "power" law at $L \rightarrow \infty$, that is localization of the electrons takes place. The dependence of the localization radius on the energy of the incident electron and on disorder parameter of the chain is found.

ՊՐԵՐԱԲԱՐ ԴԱՍԱԿՈՐՎԱԾ ՊԱՏԱՀԱԿԱՆ δ -ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՆԵՐԻՑ ԿԱԶՄՎԱԾ ՄԻԱԶԱԾ ՇՂԹԱՅԻ ԴԻՄԱԴՐՈՒԹՅՈՒՆԸ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿԻԱՆ, Դ.Ա. ԲԱԴԱԼԻԱՆ, Վ.Մ. ԳԱՍՊԱՐԻԱՆ, Ա.Ժ. ԽԱՉԱՏՐԻԱՆ

Աշխատանքում առաջարկված է միջին դիմադրության համար հավասարման լուծման մեթոդ: Ստացված է միջին դիմադրության անալիտիկ կախումը խնդրի պարամետրերից ընդհանուր դեպքում: Ցույց է տրված, որ $\langle \rho \rangle$ կախումը շղթայի երկարությունից, ցրող կենտրոնների թվի անսահման աճման դեպքում, դառնում է ցուցչային ֆունկցիա, այսինքն տեղի ունի էլեկտրոնների լոկալիզացիա: Գտնված է լոկալիզացիայի շառավիղի կախումը ընկնող էլեկտրոնի էներգիայից եւ շղթայի անկարգավորվածության պարամետրից: