Известия НАН Армении, Физика, т.35, №2, с.55-63 (2000)

УДК 539.2

РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА ОДНОМЕРНОЙ ЦЕПОЧКЕ ИЗ СЛУЧАЙНЫХ РАССЕИВАТЕЛЕЙ

Д.М. СЕДРАКЯН, Д.А. БАДАЛЯН

Ереванский государственный университет

А.Ж. ХАЧАТРЯН

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 26 мая 1999 г.)

В данной работе предложен новый эффективный метод для нахождения средних кинетических характеристик одномерной неупорядоченной системы со структурным и композиционным беспорядками. Показано, что вне зависимости от характера случайного поля системы, зависимость среднего сопротивления от числа рассеивателей системы для всех состояний одноэлектронного спектра представляет сумму трех показательных функций. Доказано, что в любой одномерной системе со структурным беспорядком имеет место локализация всех одноэлектронных состояний.

Введение

Как известно, задача определения различных корреляторов, средних кинетических характеристик одномерных случайно-неоднородных структур является одной из важных проблем теории переноса в физике неупорядоченных систем. Помимо самостоятельного физического и практического интереса, важность рассмотрения одномерных моделей обусловлена тем, что изучение свойств распространения одночастичных возбуждений в двух- и трехмерных системах наталкивается на исключительные математические трудности. В связи с возможностью апробирования методов решения одномерных задач на многомерные случаи, наиболее ценны одномерные модели, допускающие точные решения и вместе с тем обладающие достаточной физической общностью [1-14].

В данной работе нами решается задача определения среднего сопротивления системы из конечного числа случайно расположенных случайных рассеивателей, когда параметры, характеризующие поле, являются независимыми друг от друга случайными переменными. Рассмотрим пространство реализаций случайного поля, имеющего общую форму вида

$$V(x)=\sum_{n=1}^{N}V_n(x-x_n), \tag{1}$$

где $V_n(x-x_n)$ – неперекрывающиеся друг с другом и локализованные возле точек x_n одиночные потенциалы. Одиночные потенциалы $V_n(x)$ являются случайными независимыми функциями, имеющими одинаковую плотность распределения P в некотором пространстве возможных реализаций E. Так, например, среднее поле одиночного потенциала может быть записано в виде

$$\langle V_n(x)\rangle=\int_E P[V_n(x)]V_n(x)DV_n(x). \tag{2}$$

В случае, когда $V_n(x)$ является параметризированным потенциалом, континуальный интеграл (2) заменяется на обычный, где интегрирование проводится по случайным параметрам функции $V_n(x)$. В (1) точки x_n образуют некоторую решетку, в которой расстояния x_n-x_{n-1} $(n=2,3,\cdots,N)$ заданы случайным, независимым друг от друга образом и имеют одинаковое среднее значение a:

$$\langle x_n-x_{n-1}\rangle=a\,,\quad \int f(\Delta x_{n-1})\Delta x_{n-1}d\Delta x_{n-1}=0, \tag{3}$$

где $\Delta x_{n-1}=x_n-x_{n-1}-a$ и $f(\Delta x_{n-1})$ – четная, нормированная на единицу функция распределения случайной величины Δx_{n-1}.

Модель неупорядоченной системы со случайным статическим полем (1)-(3) описывает большой класс систем с так называемым смешанным беспорядком, в которых сочетаются структурный беспорядок с композиционным. Так, случайные параметры Δx_{n-1} характеризуют структурный беспорядок системы, а функции $V_n(x)$ – композиционный беспорядок. Физически важными частными случаями рассматриваемой модели являются системы со структурным порядком и композиционным беспорядком, системы со структурным беспорядком и композиционным порядком, а также всевозможные идеальные решетки, определяемые как системы, обладающие одновременно структурным и композиционным порядками.

Согласно эргодической гипотезе теории неупорядоченных систем, относящаяся к системе в целом средняя физическая величина вычисляется как среднее по случайному полю, реализующемуся в объеме системы. Процедура усреднения физической величины по ансамблю возможных реализаций случайного поля (1)-(3) записывается в виде

$$
\begin{aligned}
\langle\rho_N\rangle = \int\cdots\int \rho_N f(\Delta x_1)\cdots f(\Delta x_{N-1}) P[V_1(x)]\cdots P[V_N(x)]\cdot \\
\cdot d\Delta x_1 \cdots d\Delta x_N\, DV_1(x)\cdots DV_N(x).
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Интегрирование в (4) проводится во всем интервале значений величин Δx_{n-1} и во всем пространстве возможных реализаций функций $V_n(x)$.

В п.1 получено рекуррентное уравнение, определяющее среднее сопротивление системы $\langle\rho_N\rangle$. В п.2 найдена зависимость $\langle\rho_N\rangle$ от параметров задачи. Далее в п.3 исследуется случай неупорядоченной системы со структурным беспорядком. В заключении приводится анализ полученных результатов.

1. Уравнение для среднего сопротивления

Рассмотрим задачу вычисления среднего сопротивления $\langle\rho_N\rangle$ металла со случайными примесными центрами (1)-(3). Для этого воспользуемся формулой Ландауэра, определяющей сопротивление системы конечных размеров как отношение коэффициентов отражения и прохождения электрона через потенциал системы [15]:

$$\rho_N = |R_N|^2 / |T_N|^2, \tag{5}$$

где R_N и T_N – амплитуды отражения и прохождения электрона.

Как было показано в [16], задача определения R_N и T_N для поля (1) в общем виде может быть сведена к задаче решения системы конечно-разностных уравнений относительно дискретной переменной N:

$$D_N = r_N / t_N\, \overline{D}_{N-1}\, e^{i2kx_N} + 1/t_N\, D_{N-1}, \tag{6.а}$$

$$\overline{D}_N = r_N^* / t_N^*\, D_{N-1} e^{-i2kx_N} + 1/t_N^*\, \overline{D}_{N-1}, \tag{6.б}$$

где $D_N = 1/T_N$ и $\overline{D}_N = R_N^* / T_N^*$. В коэффициентах уравнений (6) параметры r_N и t_N соответствуют амплитудам отражения и прохождения одиночного потенциала $V_N(x)$. Отметим, что D_{N-1}, $\overline{D}_{N-1}$ соответствуют первым $N-1$ потенциалам поля (1).

Вследствие сохранения плотности тока $\left(|T_N|^2+|R_N|^2=1\right)$ сопротивление системы может быть записано через величины $D_N, \overline{D}_N$ в виде

$$\rho_N=|D_N|^2-1=\left|\overline{D}_N\right|^2. \qquad (7)$$

Прежде чем вычислять среднее сопротивление $\langle\rho_N\rangle$ (4), введем вспомогательную величину

$$S_N=D_N\overline{D}_N^*e^{-2ikx_N}. \qquad (8)$$

Тогда для величин ρ_N и S_N из (6)-(8) можно получить следующую систему разностных уравнений:

$$\rho_N=(2\alpha_N-1)\rho_{N-1}+\beta_N^*\eta_{N-1}^*S_{N-1}+\beta_N\eta_{N-1}S_{N-1}^*+\alpha_N-1, \qquad (9.а)$$

$$S_N=2\gamma_N\rho_{N-1}+\chi_N\eta_{N-1}^*S_{N-1}+\delta_N\eta_{N-1}S_{N-1}^*+\gamma_N, \qquad (9.б)$$

где

$$\alpha_N=1/|t_N|^2,\qquad \beta=r_N/|t_N|^2,\qquad \gamma_N=r_N/t_N^2,\qquad \delta_N=r_N^2/t_N^2, \qquad (10)$$

$$\chi_N=1/t_N^2,\qquad \eta_{N-1}=e^{i2k(a+\Delta x_{N-1})}.$$

Как видно из (9), коэффициенты уравнений (9.а), (9.в) содержат параметры рассеяния только N-ого одиночного потенциала поля (1) и расстояние Δx_{n-1}. Так как по определению величины ρ_{N-1} и S_{N-1} зависят только от первых N–1 потенциалов системы и расстояний Δx_{n-1} $(n=2,3,\cdots,N-1)$, то при усреднении системы уравнений (9), согласно (4), все коэффициенты и соответствующие им переменные усредняются отдельно. Так, например,

$$\langle(2\alpha_N-1)\rho_{N-1}\rangle=\langle(2\alpha_N-1)\rangle\langle\rho_{N-1}\rangle \text{ и т.д.}$$

Если ввести обозначения

$$\alpha=\langle\alpha_N\rangle,\ \beta=\langle\beta_N\rangle,\ \gamma=\langle\gamma_N\rangle,\ \delta=\langle\delta_N\rangle,\ \chi=\langle\chi_N\rangle,\ \eta=\langle\eta_{N-1}\rangle, \qquad (11)$$

то, усредняя по случайному полю (1)-(3), система уравнений (9) запишется в виде

$$\langle\rho_N\rangle=(2\alpha-1)\langle\rho_{N-1}\rangle+\beta^*\eta^*\langle S_{N-1}\rangle+\beta\eta\left\langle S_{N-1}^*\right\rangle+\alpha-1, \qquad (12.а)$$

$$\langle S_N\rangle=2\gamma\langle\rho_{N-1}\rangle+\chi\eta^*\langle S_{N-1}\rangle+\delta\eta\left\langle S_{N-1}^*\right\rangle+\gamma. \qquad (12.б)$$

Система уравнений (12) позволяет в общем виде получить рекуррентные уравнения отдельно для $\langle \rho_{\rm N} \rangle$ и $\langle S_{\rm N} \rangle$. Рассматривая ее как линейную неоднородную систему алгебраических уравнений, для функции $\langle \rho_{\rm N} \rangle$ можно получить следующее разностное уравнение:

$$\langle \rho_N \rangle = A\langle \rho_{N-1} \rangle + B\langle \rho_{N-2} \rangle + C\langle \rho_{N-3} \rangle + D, \tag{13}$$

с начальными условиями

$$\langle \rho_0 \rangle = 0,\ \langle \rho_1 \rangle = \alpha - 1,\quad \langle \rho_2 \rangle = 2\alpha(\alpha-1) + d\,, \tag{13.a}$$

где

$$\begin{aligned} &A = 2\alpha - 1 + \theta,\ B = 2d - \nu - (2\alpha - 1)\,\theta, \\ &C = (2\alpha - 1)\nu + 2u,\ D = (\alpha - 1)(1 - \theta + \nu) + d - u \end{aligned} \tag{14}$$

и

$$\begin{aligned} &d = 2\,\mathrm{Re}(\beta\eta\gamma^*),\ \ u = 2\,\mathrm{Re}(\Gamma\eta\gamma^*), \\ &\theta = 2\,\mathrm{Re}(\eta^*\chi),\ \ \nu = |\eta|^2(|\chi|^2 - |\delta|^2). \end{aligned} \tag{15}$$

Как видно из (13), среднее сопротивление $\langle \rho_{\rm N} \rangle$ как функция от рассеивающих центров системы удовлетворяет неоднородному линейно-разностному уравнению.

2. Решение уравнения для среднего сопротивления $\langle \rho_{\rm N} \rangle$

Решение уравнения (13) ищем в виде

$$\langle \rho_N \rangle = \sum_{j=1}^{p} L_j x_j^N + L_0\,. \tag{16}$$

Подставляя решение (16) в уравнение (13) и требуя его выполнения, получим характеристическое уравнение, определяющее величины $x_j\,(j = 1,2,3)$, и уравнение для L_0:

$$x_j^3 - Ax_j^2 - Bx_j - C = 0, \tag{17}$$

и

$$L_0 = L_0(A + B + C) + D. \tag{18}$$

Подставляя в (18) значения A, B, C, D из (14), легко получить $L_0 = -1/2$. Коэффициенты L_j в решении (16) можно выразить через корни уравнения (17) x_j и $\langle \rho_2 \rangle, \langle \rho_1 \rangle, \langle \rho_0 \rangle$ (13.a):

$$L_1 = \frac{2d - (2\alpha - 1)(x_2 + x_3 - 2\alpha - 1) + x_2 x_3}{(x_2 - x_1)(x_3 - x_1)}\,. \tag{19}$$

L_2 и L_3 получаются из (19) циклической перестановкой букв x_1, x_2, x_3.

Таким образом, мы показали, что вне зависимости от характера случайного поля одномерной системы, зависимость среднего сопротивления от ее длины для всех состояний одноэлектронного спектра представляет сумму трех показательных функций.

3. Неупорядоченная система со структурным беспорядком

Рассмотрим модель, в которой одинаковые неслучайные потенциалы расположены на прямой случайным образом. Будем считать, что среднее расстояние между ними больше радиуса их действия. В этом случае средние параметры, характеризующие рассеяние электрона на одиночном потенциале системы, примут вид

$$\begin{aligned} &\alpha = 1/|t|^2,\ \beta = r/|t|^2,\ \gamma = r/t^2,\ \delta = r^2/t^2, \\ &\chi = 1/t^2,\ \eta = n^2\langle \exp(i2ka)\rangle,\ n^2 = \langle \exp(i2k\Delta x_{N-1})\rangle, \end{aligned} \tag{20}$$

где r, t – амплитуды отражения и прохождения электрона через одиночный потенциал системы, которые в рассматриваемой модели являются неслучайными величинами.

Подставляя (20) в (14), для коэффициентов уравнения (17) получим следующие выражения:

$$A = n^2 l + m,\ B = -n^2 l + n^2 m,\ C = n^4,\ D = (1 - n^4)\rho_1, \tag{21}$$

где

$$m = (1 - n^2)(2\rho_1 + 1),\ \rho_1 = |r|^2/|t|^2,\ l = 4\cos^2\gamma - 1,\ \cos\gamma = \mathrm{Re}(e^{-ika}t^{-1}).$$

Начальные условия (13.а) в этом случае примут вид

$$\langle\rho_0\rangle = 0,\ \langle\rho_1\rangle = |r|^2/|t|^2,\ \ \langle\rho_2\rangle = (n^2 + m + 1)\rho_1. \tag{22}$$

Докажем теперь, что в рассматриваемой модели, вне зависимости от характера рассеяния на одиночном потенциале, все одноэлектронные состояния локализованы, т.е. радиус локализации

$$\zeta = \lim_{N\to\infty}\frac{Na}{\ln\langle\rho_N\rangle} \tag{23}$$

конечен и не зависит от N для любых значений параметров r, t, k. Для этого приступим к исследованию корней характеристического уравнения (13). Из теоремы Виета следует, что корни (13)

$$x_1 x_2 x_3 = n^4 \geq 0. \tag{24}$$

Из (24) следует, что если все три корня действительны, то все они должны быть положительными, либо один положительный, а два других отрицательны. Когда уравнение (13) имеет один действительный корень, то он должен быть положительным.

Покажем, что среди корней уравнения (13) всегда имеется хотя бы один действительный корень, который больше единицы. Рассмотрим функцию

$$f(x) = x^3 - (n^2 l + m)x^2 + n^2(l - m)x - n^4, \tag{25}$$

нули которой определяют корни уравнения (13). Легко убедиться, что для всех значений параметров l, m, n^2 функция $f(x)$ в точках $x = \pm 1$ отрицательна, при $x \to \infty$ функция $f(x) \to \infty$ и при $x \to -\infty$ $f(x) \to -\infty$. Отметим, что функция $f(x)$ имеет два экстремума. Из вышеперечисленных свойств функции $f(x)$ следует, что уравнение $f(x) = 0$ всегда имеет один действительный корень, больший единицы и больший модулей двух остальных корней. Отсюда, в частности, следует, что при $N \to \infty$ асимптотическое поведение среднего сопротивления Ландауэра (16) имеет вид

$$\langle \rho_N \rangle = L_1 y_1^{\,N} - 1/2. \tag{26}$$

Здесь через y_1 обозначен корень характеристического уравнения (13), который $y_1 \geq 1$, и $1 \geq |y_2|, |y_3|$, где y_2, y_3 – остальные два корня.

Подставляя (26) в (23), получим зависимость радиуса локализации от энергий одноэлектронных состояний и параметра беспорядка системы:

$$\zeta = \frac{a}{\ln y_1}. \tag{27}$$

Как видно из (14), (15), зависимость радиуса локализации от параметров задачи имеет сложный трансцендентный характер.

Интересно рассмотреть случай слабого беспорядка рассматриваемой модели $(1 - n^2 = s \ll 1)$ для энергии падающего электрона, соответствующей разрешенной зоне $(|\mathrm{Re}(e^{-ika}t^{-1})| \leq 1)$. В этом случае будем искать решение y_1 в виде

$$y_1 = 1 + \Delta y \tag{28}$$

и $\Delta y \ll 1$.

Подставляя (28) в уравнение (13) и оставляя только члены, линейные по Δy, получим

$$\Delta y = 4\rho_1 s / \sin^2 \gamma. \tag{29}$$

Подставляя (29) в формулу (27), для радиуса локализации окончательно получим

$$\zeta^{-1} = \rho_1 s / \sin^2 \gamma . \qquad (30)$$

Как видно из (30), при $s = 0$ (упорядоченная система) радиус локализации обращается в бесконечность.

Заключение

Развитый в данной работе метод позволяет найти среднее сопротивление неупорядоченной системы потенциалов с произвольными композиционным и структурным беспорядками. Особый интерес представляет техника получения рекуррентного уравнения для $\langle \rho_N \rangle$ системы с произвольным беспорядком. Предложенный метод можно легко обобщить для исследования вопросов самоусредняемости ρ_N.

Подробно исследовано решение уравнения $\langle \rho_N \rangle$ для системы с произвольным структурным беспорядком. Важным является результат, утверждающий, что вне зависимости от вида одиночных потенциалов системы, структурный беспорядок всегда приводит к локализации всех состояний одноэлектронного спектра.

В заключение рассмотрим класс неупорядоченных систем, состоящих из так называемых случайных безотражательных ям, в которых [17]

$$r(k) = 0 \quad \text{и} \quad |t(k)| = 1 \qquad (31)$$

для всех k и для всех реализаций поля ямы. В этом случае из (31) и (10) параметры уравнения (13) запишутся

$$\alpha = 1,\ \beta = 0,\ \gamma = 0,\ \delta = 0,\ \chi = \langle \chi_N \rangle,\ \eta = \langle \eta_{N-1} \rangle . \qquad (32)$$

Согласно (32), формулы (14),(15) и (13.а) примут вид

$$A = 0,\ B = 0,\ C = 0,\ D = 0 \qquad (33)$$

и

$$\langle \rho_0 \rangle = 0,\ \langle \rho_1 \rangle = 0,\ \langle \rho_2 \rangle = 0 . \qquad (34)$$

Тогда из уравнения (13) вытекает, что

$$\langle \rho_N \rangle = 0 \qquad (35)$$

для любого k и N. Результат (35) означает полную делокализацию одноэлектронных состояний в одномерной неупорядоченной системе, что является особенностью рассматриваемой модели (31). Аналогичный результат был получен в работе [18] методом обратной задачи рассеяния.

ЛИТЕРАТУРА

1. **I.M.Lifshits, S.A.Gredeskul, L.A.Pastur.** Introduction to the Theory of Disordered Systems. New York, Wiley, 1988.
2. **P.W.Anderson, D.J.Thouless, E.Abrahams, A.S.Fisher.** Phys. Rev., **B22**, 3519 (1980).
3. **T.Hirota and K.Ishii.** Prog. Theor. Phys., **45**, 1713 (1971).
4. **D.J.Thouless.** J. Phys., **C5**, 77 (1972).
5. **В.Н.Пригодин.** ЖЭТФ, **79**, 2338 (1980).
6. **В.Н.Мельников.** ФТТ, **22**, 2404 (1980).
7. **A.Abrikosov.** Solid State Commun., **37**, 997 (1981).
8. **M.Ya.Azbel.** Phys. Rev., **B22**, 4106 (1983).
9. **В.Н.Перель, Д.Г.Поляков.** ЖЭТФ, **86**, 352 (1984).
10. **А.Н.Дмитриев.** ЖЭТФ, **95**, 234 (1989)
11. **P.Erdos, R.C.Herndon.** Adv. Phys., **31**, 65 (1982), Solid State Commun., **98**, 495 (1996).
12. **О.Н.Дорохов.** ЖЭТФ, **101**, 2001 (1992).
13. **M.Abrahams, R.Berkovits.** Phys. Rev. Lett., **70**, 1509 (1993).
14. **Д.М.Седракян, Д.А.Бадалян, В.М.Гаспарян, А.Ж.Хачатрян.** ЖЭТФ, **109**, 243 (1996), ЖЭТФ, **111**, 575 (1997).
15. **R.Landauer.** Phil. Mag., **21**, 863 (1970).
16. **Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян.** ДНАН Армении, **98**, 301 (1998), ДНАН Армении,**99**, №3 (1999, в печати).
17. **Ф.Колоджеро, А.Докаеперис.** Спектральные преобразования и солитоны, М., Наука, 1980.
18. **Б.Н.Шалаев.** ФТТ, **32**, 3586 (1990).

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ՑՐՈՒՄԸ ՄԻԱՉԱՓ ՊԱՏԱՀԱԿԱՆ ՑՐՈՂ ԿԵՆՏՐՈՆՆԵՐԻՑ ԲԱՂԿԱՑԱԾ ՑԱՆՑԻ ՎՐԱ

Դ.Մ. ՍԵԴՐԱԿՅԱՆ, Դ.Հ. ԲԱԴԱԼՅԱՆ, Ա.Ժ. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ

Միաչափ կառուցվածքային և կոմպոզիցիոն անկարգավորվածություններ ունեցող սիստեմի միջին կինետիկ բնութագրերը գտնելու համար առաջարկված է նոր էֆեկտիվ մեթոդ: Ստացված է հավասարում, որը որոշում է միջին դիմադրության կախվածությունը սիստեմի ցրող կենտրոնների թվից, էլեկտրոնի էներգիայից և պատահական դաշտի պարամետրերից: Ցույց է տրված, որ անկախ պատահական դաշտի բնույթից, միջին դիմադրության կախումը սիստեմի ցրող կենտրոնների թվից, մեկ էլեկտրոնային սպեկտրի բոլոր վիճակների համար ունի երեք ցուցչային ֆունկցիաների գումարի տեսք:

ELECTRON SCATTERING ON THE ONE-DIMENSIONAL CHAIN FROM RANDOM POTENTIALS

D.M. SEDRAKIAN, D.H. BADALYAN, A.Zh. KHACHATRIAN

New effective method is suggested for calculation of kinetic characteristics of the one-dimensional disordered systems. It is shown that the dependence of the average resistance on the length of the system is a sum of three exponential functions for arbitrary random field. It is proved that all one-electron states are localized for an arbitrary one-dimensional structural disordered system.