

УДК 539.2

О ДВИЖЕНИИ ЭЛЕКТРОНА В ОДНОМЕРНОЙ НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ РЕШЕТКЕ ИЗ ПРЯМОУГОЛЬНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ БАРЬЕРОВ

Д.М. СЕДРАКЯН, Д.А. БАДАЛЯН

Ереванский государственный университет

А.Ж. ХАЧАТРЯН

Государственный инженерный университет Армении

(Поступила в редакцию 15 октября 2001 г.)

Рассмотрена задача прохождения электрона через случайную цепочку из прямоугольных потенциалов. Показано, что при отсутствии в цепочке структурного беспорядка могут возникнуть отдельные делокализованные состояния в случае, когда прямоугольные потенциалы со случайной шириной имеют одно и то же значение потенциала.

1. Введение

В последнее время наблюдается повышенный интерес к проблеме прохождения электрона через материалы, в которых существуют различные типы беспорядка [1-4]. В аморфных телах и жидких металлах, из-за отсутствия трехмерной периодичности, возникает структурный беспорядок. Расплавы металлов с солью, неупорядоченные сплавы и другие многокомпонентные системы обладают неупорядоченностью состава, т.е. композиционным беспорядком. При прохождении электрона через эти вещества существенное значение имеет электронная структура неупорядоченных систем. Однако, даже когда эта структура известна, задача рассеяния электрона на двух- и трехмерных системах встречает непреодолимые математические трудности. В связи с этим подавляющее большинство теоретических работ посвящено изучению прохождения электрона через неупорядоченную одномерную решетку. Несмотря на то, что эти теории позволяют, в принципе, описать почти все эффекты, наблюдаемые в реальных системах, они тем не менее обладают рядом недостатков: рассматривают задачу рассеяния для частных видов потенциала (главным образом исследованы цепочки из δ -потенциалов), получены решения для слабого и, наоборот, для сильного рассеивающих полей, точные результаты получены только для определенных значений

энергии падающего электрона и т.д.

В [5] развит новый метод, позволяющий точно определить среднее сопротивление одномерной системы из конечного числа случайно расположенных рассеивателей произвольного вида. Соответствующий подход сводит задачу нахождения среднего сопротивления к нахождению конечно-разностного уравнения. В настоящей работе на основе общих результатов работы [5] исследуется характер рассеяния электрона на одномерной случайной решетке, построенной из потенциальных барьеров прямоугольной формы.

2. Сопротивление одномерной решетки из случайно расположенных случайных прямоугольных потенциалов

Рассмотрим одномерную модель случайной решетки, в которой рассеивающие центры, характеризуемые потенциалами произвольной формы со случайными независимыми параметрами, расположены в точках x_j ($j=1,2,\dots,N$, N – полное число рассеивателей). Пусть точки x_j образуют одномерную цепочку, в которой расстояния $x_j - x_{j-1}$ заданы случайным, независимым друг от друга образом и имеют одинаковое среднее значение a . Приведенная выше модель неупорядоченной решетки описывает большой класс систем со смешанным беспорядком, в которых структурный беспорядок сочетается с композиционным.

При падении электрона с энергией $E = k_0^2$ на кристалл среднее сопротивление Ландауэра $\langle \rho_N \rangle$ системы определяется решением следующего конечно-разностного уравнения [5]:

$$\langle \rho_N \rangle = a_1 \langle \rho_{N-1} \rangle + a_2 \langle \rho_{N-2} \rangle + a_3 \langle \rho_{N-3} \rangle + a_0, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} a_1 &= \theta + 2\alpha - 1, \quad a_2 = 2d - \vartheta - (2\alpha - 1)\theta, \\ a_3 &= (2\alpha - 1)\vartheta + 2u, \quad 2a_0 = a_1 + a_2 + a_3 \end{aligned} \quad (2)$$

и

$$\begin{aligned} \theta &= 2 \operatorname{Re}(\chi \eta^*), \quad d = 2 \operatorname{Re}(\beta \eta \gamma^*), \quad u = 2 \operatorname{Re}(\Gamma \eta \gamma^*), \\ \vartheta &= |\eta|^2 (|\chi|^2 - |\delta|^2), \quad \Gamma = \eta^* (\chi \beta - \delta \beta^*). \end{aligned} \quad (3)$$

В формулах (2), (3) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \alpha &= \langle |t_j|^2 \rangle, \quad \beta = \langle r_j / |t_j|^2 \rangle, \quad \gamma = \langle r_j / t_j^2 \rangle, \\ \chi &= \langle 1 / t_j^2 \rangle, \quad \delta = \langle r_j^2 / t_j^2 \rangle, \quad \eta = n^2 \exp\{i2k_0 a\}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $n^2 = \langle \exp\{i2k_0 \Delta x_{j-1}\} \rangle$ – параметр структурного беспорядка ($\Delta x_{j-1} = x_j - x_{j-1} - a$), $r_j \exp\{i2k_0 x_j\}$ – амплитуда отражения и t_j – ампли-

туда прохождения электрона при рассеянии на потенциале $V_j(x_j)$. Скобки $\langle \dots \rangle$ означают среднее по ансамблю всевозможных реализаций случайного поля.

Решение уравнения (1) имеет вид

$$\langle \rho_N \rangle = \sum_{i=1}^3 L_i Z_i^N - \frac{1}{2}, \quad (5)$$

где Z_i – корни кубического уравнения

$$Z^3 - a_1 Z^2 - a_2 Z - a_3 = 0. \quad (6)$$

Коэффициент L_1 определяется из формулы

$$L_1 = \frac{2d - (2\alpha - 1)(Z_2 + Z_3 - 2\alpha - 1) + Z_2 Z_3}{(Z_2 - Z_1)(Z_3 - Z_1)}, \quad (7)$$

L_2 и L_3 получаются из (7) циклической перестановкой букв Z_1, Z_2, Z_3 .

Формулы (1)-(7) в общей форме позволяют определить среднее сопротивление одномерной неупорядоченной решетки со структурным и композиционным беспорядком. В качестве конкретного применения полученных формул рассмотрим цепочку, состоящую из прямоугольных потенциалов.

Амплитуды рассеяния электрона r_j и t_j для прямоугольного потенциала определяются известными формулами [6] (центр потенциала совпадает с серединой потенциала и электрон рассеивается слева направо)

$$r_j = \frac{(k_0^2 - k_j^2) \sin k_j l_j \exp\{-ik_0 l_j\}}{(k_0^2 + k_j^2) \sin k_j l_j + 2ik_0 k_j \cos k_j l_j}, \quad (8)$$

$$t_j = \frac{2ik_0 k_j \exp\{-ik_0 l_j\}}{(k_0^2 + k_j^2) \sin k_j l_j + 2ik_0 k_j \cos k_j l_j}, \quad (9)$$

где l_j – ширина j -го потенциала. В случае барьера $k_j^2 = E - V_j$ (V_j – высота барьера). Для случая ямы $k_j^2 = E + V_j$ (V_j – глубина ямы). Представим r_j и t_j из (8), (9) в виде

$$1/t_j = A_j + iB_j, \quad r_j/t_j = iC_j, \quad (10)$$

где A_j, B_j, C_j являются реальными величинами:

$$A_j = \cos k_0 l_j \cos k_j l_j + \frac{k_j^2 + k_0^2}{2k_j k_0} \sin k_0 l_j \sin k_j l_j, \\ B_j = \sin k_0 l_j \cos k_j l_j - \frac{k_j^2 + k_0^2}{2k_j k_0} \cos k_0 l_j \sin k_j l_j, \quad C_j = \frac{k_j^2 - k_0^2}{2k_j k_0} \sin k_j l_j. \quad (11)$$

Используя (2)-(4) и (10), (11), получим

$$\begin{aligned}
 a_1 &= n^2 (\cos^2 \alpha_1 - 1) + (1 - n^2)(1 + 2p), \\
 a_2 &= -n^2 (4 \cos^2 \alpha_1 - 1) - 2n^2 (y + P)(4 \cos^2 \alpha_2 - 1) + \\
 &+ 8n^2 [\delta_{AC} - \delta_{BC} - (y + P)(1 - \phi_2^2)] \sin^2 k_0 a + n^2 (1 - n^2)(1 + 2P - 4\delta_{AB}) - \\
 &- n^2 [4(\delta_{AC} - \delta_{AB} - \delta_{BC})(-6(y + P))], \\
 a_3 &= n^4 [1 - 4(1 - 2P)\delta_{AB} + 4(\phi_1 - P)\delta_{AC} - (4\phi_1 + P)\delta_{BC} + 16(y + p)\phi_2^2].
 \end{aligned} \quad (12)$$

В (12) введены следующие обозначения:

$$\begin{aligned}
 \cos^2 \alpha_1 &= \langle A_j^2 \rangle \cos^2 k_0 a + \phi_2 \sin 2k_0 a + \langle B_j^2 \rangle \sin^2 k_0 a, \\
 \cos^2 \alpha_2 &= \cos^2 k_0 a + \phi_2 \sin 2k_0 a + \phi_2^2 \sin^2 k_0 a, \\
 \phi_1 &= \langle (A_j^2 - B_j^2) \rangle, \quad \phi_2 = \langle A_j B_j \rangle, \quad \phi_2 y = -\langle B_j C_j \rangle \langle A_j C_j \rangle, \quad P = \langle C_j^2 \rangle,
 \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\delta_{AB} = \langle A_j^2 \rangle \langle B_j^2 \rangle - \langle A_j B_j \rangle^2, \quad \delta_{AC} = \langle A_j^2 \rangle \langle C_j^2 \rangle - \langle A_j C_j \rangle^2, \quad \delta_{BC} = \langle B_j^2 \rangle \langle C_j^2 \rangle - \langle B_j C_j \rangle^2.$$

Как видно из (12), (13), задача определения величин a_1, a_2, a_3 сводится к задаче вычисления средних от функций A_j, B_j, C_j , которые зависят от случайных параметров прямоугольного барьера l_j и V_j . Знание a_1, a_2, a_3 позволяет определить корни уравнения (6) Z_j и коэффициенты решения (5) L_j . Используя полученные таким образом значения Z_j и L_j , можно определить зависимость среднего сопротивления $\langle \rho_N \rangle$ (5) от числа рассеивающих центров (длины образца), параметров беспорядка цепочки и энергии электрона $E = k_0^2$.

Рассмотрим цепочку с барьерами, ширина которых намного меньше длины волны де Бройля свободного электрона: $l_j k_0 \ll 1$ ($l_j k_j \ll 1$) для произвольного j . Разлагая функции в (11) по степеням малых $l_j k_0, l_j k_j$ и оставляя только члены, линейные по ним, получим

$$1/t_j = 1 + iV_j l_j / 2k_0, \quad r_j / t_j = -iV_j l_j / 2k_0. \quad (14)$$

Если ввести обозначения $U_j = V_j l_j$, то полученные формулы совпадут с соответствующими формулами для цепочки из δ -потенциалов, имеющих случайную амплитуду U_j . Последнее обстоятельство позволяет распространить все результаты работы [5], полученные для одномерной цепочки из δ -потенциалов, на цепочку из «узких» прямоугольных потенциалов.

3. Локализация состояний одноэлектронного спектра

Одной из главных особенностей электронной структуры рассматриваемой неупорядоченной системы является появление так называемых локализованных состояний. Вопрос о том, как сформулировать критерий локализованности состояний, далеко не тривиален. Используются несколько различных критериев определения локализации [7,8]. В [5] предложена простая мера для выяснения характера состояний (локализованности или делокализованности) в одномерной неупорядоченной системе. Она сводится к определению знака функции

$$F(Z) = Z^3 - a_1 Z^2 - a_2 Z - a_3 \quad (15)$$

в точке $Z=1$. Если $F(Z) < 0$, то все электронные состояния локализованы. В противном случае, когда $F(Z) \geq 0$, состояния являются делокализованными.

Общепринято (см., например, [1]), что в одномерной системе включение сколь угодно слабого случайного поля приводит к локализации всех состояний одноэлектронного спектра. В [4] было строго доказано, что в цепочке из δ -потенциалов со смешанным беспорядком действительно имеет место полная локализация состояний. Наличие в системе только структурного беспорядка также приводит к локализации всех состояний спектра [9]. Вместе с тем известен класс «экзотических» одномерных систем, состоящих из так называемых случайных безотражательных ям, где вместо полной локализации проявляется полная делокализация состояний [10].

Как мы покажем ниже, в цепочке из прямоугольных потенциалов, имеющих равное значения потенциала V и случайное значение ширин, при отсутствии структурного беспорядка ($n^2 = 1$) могут возникнуть отдельные делокализованные состояния. Для рассматриваемого случая из (12), (15) имеем

$$F(1) = 8P(\delta_{AC} - \delta_{AB}) + 4(\delta_{AC} - \delta_{BC})(\cos 2k_0 a - \phi_1 - P) + 8\phi_2(y + P)(\sin 2k_0 a - 2\phi_2). \quad (16)$$

Определение знака функций $F(1)$ в общем виде требует вычисления корреляторов типа $\langle A_j^2 \rangle$, $\langle A_j B_j \rangle$ и т.д. с наперед заданной функцией распределения для случайных величин l_j . При малых флуктуациях случайной величины $\Delta l_j = l_j - \langle l_j \rangle$ для вычисления можно воспользоваться формулой [11]

$$\langle \Delta \varphi_1(l) \Delta \varphi_2(l) \rangle = \left. \frac{d\varphi_1}{dl} \right|_{l=\langle l \rangle} \left. \frac{d\varphi_2}{dl} \right|_{l=\langle l \rangle} \langle (\Delta l)^2 \rangle, \quad (17)$$

где $\Delta \varphi_{1,2}(l) = \varphi_{1,2}(l) - \varphi_{1,2}(\langle l \rangle)$ и $\varphi_1(l)$, $\varphi_2(l)$ являются произвольными функциями от случайной величины l . Отметим, что в (17) подразумевается, что функции $\varphi_1(l)$, $\varphi_2(l)$ мало меняются при изменениях аргу-

мента порядка $\Delta l = \sqrt{(\Delta l)^2}$ и производные $d\varphi_1(l)/dl$, $d\varphi_2(l)/dl$ отличны от нуля в точке $l = \langle l \rangle$. Применение формулы (17) для вычисления $F(1)$ приводит к следующему выражению:

$$F(1) = -8(m_1 \sin k_0 a - m_2 \cos k_0 a)^2 \langle (\Delta l)^2 \rangle, \quad (18)$$

где

$$m_1 = AC' - CA', \quad m_2 = BC' - CB', \quad (19)$$

A, B, C и A', B', C' — значения функций A_j, B_j, C_j и их производных (по l_j) в точке $l_j = l_{cp}$, соответственно. Отсюда, во-первых, видно, что в обычной модели Кронига-Пенни, где $\langle (\Delta l)^2 \rangle = 0$, электрон не может быть локализован. Во-вторых, для неупорядоченной цепочки в общем случае $f(1) < 0$, что означает наличие локализации электронных состояний в окрестности узлов одномерной случайной решетки.

Интересно отметить, что при определенных значениях энергии падающего электрона условие $f(1) < 0$ может нарушаться. Это возможно, если имеет место равенство

$$\operatorname{tg} k_0 a = m_2 / m_1. \quad (20)$$

Подстановка (19), (11) в (20) дает

$$\operatorname{tg} k_0 a = \frac{F_1 \sin k_0 l_{cp} - F_2 \cos k_0 l_{cp}}{F_1 \cos k_0 l_{cp} + F_2 \sin k_0 l_{cp}}, \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} F_1 &= k^2 (1 + \cos^2 k l_{cp}) - k_0^2 \sin^2 k l_{cp}, \\ F_2 &= 2k_0 k \sin k l_{cp} \cos k l_{cp}. \end{aligned} \quad (22)$$

При $F_1 \neq 0$ из (21) получим

$$\operatorname{tg} k_0 a = \operatorname{tg}(k_0 l_{cp} - \phi), \quad (23)$$

где

$$\phi = \operatorname{arctg}(F_2 / F_1).$$

Условие (23) есть сложное трансцендентное уравнение, связывающее величины $k_0 = \sqrt{E}$, V , l_{cp} и a . Оно может иметь место при определенном наборе (наборах!) параметров модели и энергии свободного электрона. Однако, даже не решая уравнения (23), можно показать, что, в принципе, равенство (23) выполнимо. Действительно, в модели с неперекрывающимися, слабо флуктуирующими прямоугольными барьерами $a > \max \{l_j\}$, и, следовательно, $a > l_{cp}$. Так как a , по существу, произвольный параметр, то для выполнения (23) достаточно,

чтобы $\phi < 0$. Последнее требование приводит к неравенству

$$F_2 / F_1 < 0. \quad (24)$$

Если $F_2 > 0$, то необходимо, чтобы $F_1 < 0$. Тогда из (22) получим систему неравенств

$$\sin 2kl_{cp} > 0 \quad \text{и} \quad \cos 2kl_{cp} < (2\mu - 1), \quad (25)$$

где $\mu = (k_0^2 - k^2) / (k_0^2 + k^2)$. Так как для прямоугольного барьера $k^2 < k_0^2$, то $|2\mu - 1| < 1$, поэтому система (25) всегда имеет решение

$$2\pi n + \arccos(2\mu - 1) < 2kl_{cp} < \pi + 2\pi n, \quad n \in Z. \quad (26)$$

Другая возможность $F_2 < 0$, $F_1 > 0$ приводит к обратной системе неравенств:

$$\sin 2kl_{cp} < 0 \quad \text{и} \quad \cos 2kl_{cp} > 2\mu - 1, \quad (27)$$

решением которой является

$$2\pi n - \arccos(2\mu - 1) < 2kl_{cp} < 2\pi n. \quad (28)$$

Подставив в (23) такие значения параметров l_{cp}, k_0, k , которые отвечают условиям (26) или (28), получим расстояние $a > l_{cp}$. А это означает, что в рассмотренной модели со случайной шириной потенциальных барьеров, при отдельных значениях k_0 падающего электрона эффект полной локализации состояний может и не реализоваться.

ЛИТЕРАТУРА

1. M.I.Lifshitz, S.A.Gredeskul, L.A.Pastur. Introduction to the Theory of Disordered System. Wiley, New York, 1988.
2. P.W.Anderson. Phys. Rev., **109**, 1499 (1958); **B23**, 4828 (1981); Phil. Mag., **52**, 4106 (1985).
3. C.W.J.Benakker. Rev. Mod. Phys., **69**, 731 (1997); A.D.Merlin, Ya.V.Fyodorov. J. Phys. A, **26**, 1056 (1993).
4. A.A.Asatryan et al. Phys. Rev., **B54**, 3916 (1996); Phys. Rev., **B57**, 13535 (1998); I.V.Yurkevich, I.V.Lerner. Phys. Rev. Lett., **82**, 5080 (1999).
5. Д.М.Седракан, Д.А.Бадалян, А.Ж.Хачатрян. ФТТ, **42**, 747 (2000).
6. L.I.Schist. Quantum Mechanics. McGraw-Hill Company, New York, 1955.
7. В.Л.Шкловский, А.Л.Эфрос. Электронные свойства легированных полупроводников. М., Наука, 1979.
8. V.N.Prigodin. Sov. Phys. JETP, **52**, 1185 (1980); A.Abrikosov. Solid State Commun., **37**, 997 (1981), V.Melnikov. Sov. Phys. Solid State, **23**, 444 (1981).
9. A.Zh.Khachatrian, G.Robke, D.H.Badalyan, D.M.Sedrakian. Phys. Rev., **B62**, 13502 (2000).
10. Б.Н.Шалаев. ФТТ, **32**, 3586 (1990).
11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика. М., Наука, 1976.

ԷԼԵԿՏՐՈՆԻ ՇԱՐԺՈՒՄԸ ՄԻԱԶԱՓ ՈՒՂԱՆԿՅՈՒՆ ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՆԵՐԻՑ
ԲԱՐԿԱՑԱԾ ՈՉ ԿԱՐԳԱՎՈՐՎԱԾ ՑԱՆՅՈՒՄ

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

Դիտարկված է էլեկտրոնի անցման խնդիրը ոչ կարգավորված ուղղանկյուն պոտենցիալներից բաղկացած ցանցի համար: Ցույց է տրված, որ կառուցվացքային անկարգավորվածության բացակայության դեպքում կարող են առաջանալ դելոկալիզացված վիճակներ:

ELECTRON MOTION IN A ONE-DIMENSIONAL NONREGULAR CHAIN
CONSISTING OF RECTANGULAR POTENTIALS

D.M. SEDRAKIAN, D.H. BADALIAN, A.ZH. KHACHATRIAN

An electron transmission through a one-dimensional chain of rectangular potentials is considered. It is shown that the absence of structural disorder in the chain leads to the delocalization of some states in the case, when rectangular potentials with random width have the same value of the potential.

