

ПЕРЕНОС ЧАСТИЦ В НЕУПОРЯДОЧЕННОЙ СРЕДЕ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

*В. А. Швейгерт**, *А. Л. Александров*

*Институт теоретической и прикладной механики
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 18 ноября 1997 г.

Решается многоцентровое уравнение Шредингера для расчета коэффициента прохождения частицы через плоский слой хаотически расположенных точечных рассеивающих центров. Показано, что при длине рассеяния на отдельном центре, сравнимой с длиной волны частицы λ или большей, оказывается верной гипотеза Иоффе—Регеля, согласно которой прозрачность слоя с увеличением плотности рассеивателей выходит на постоянное значение и эффективная длина пробега частиц остается порядка λ . В случае длины рассеяния, малой по сравнению с λ , гипотеза Иоффе—Регеля не подтверждается. При уменьшении длины рассеяния постепенно начинает действовать приближение эффективного потенциала рассеивателей, и в зависимости от величины последнего прохождение частиц может происходить в режимах как туннелирования, так и диффузии, причем эффективная длина пробега может быть много меньше λ .

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача о квантовом переносе частиц в неупорядоченной среде, помимо своего фундаментального значения, приобретает в последнее время все больший прикладной интерес, связанный с переходом в микроэлектронной технике к размерам приборов, измеряемых нанометрами. Если длина волны электрона становится больше характерных размеров прибора, перестают действовать традиционные физические и математические модели, описывающие его работу. В последнее время также открыт ряд новых явлений (слабая локализация, универсальность флуктуаций кондактанса и т. д.) при исследовании мезоскопического транспорта электронов, когда длина неупругого рассеяния значительно больше всех остальных характерных длин. Все это вызывает большой интерес к разработке различных подходов к описанию мезоскопического переноса носителей заряда, основанных на численном решении трехмерного уравнения Шредингера для многих центров рассеяния.

Существующие представления о прохождении частиц в сильно неупорядоченных средах довольно противоречивы. Согласно гипотезе Иоффе и Регеля [1] длина свободного пробега l не может быть меньше длины волны λ . Поэтому Мотт [2] выдвинул концепцию минимальной металлической проводимости, когда с увеличением концентрации рассеивающих центров проводимость и коэффициент диффузии выходят на некоторые минимальные значения.

* E-mail: schweig@site.itam.nsc.ru

Более современная точка зрения основывается на скейлинговой теории, развитой для случая, когда размер области неупорядоченной среды $d \gg \lambda$. Согласно этой теории с увеличением неупорядоченности среды происходит локализация Андерсена и вблизи критической концентрации рассеивающих центров проводимость и коэффициент диффузии должны уменьшаться по степенному закону [3]. Вопрос о справедливости однопараметрической скейлинговой теории является в настоящее время дискуссионным [4]. Обнаружение аномально больших статистических флуктуаций кондактанса в неупорядоченных средах указывает на ее ограниченность [5].

Строгие теоретические подходы ограничены областью слабой локализации ($l \ll \lambda$). Поэтому для общего случая, когда все характерные длины близки по порядку величины ($d \sim l \sim \lambda$), проведение численных экспериментов остается наиболее эффективным методом исследования. В частности, большой интерес представляет расчетная проверка гипотезы Иоффе—Регеля.

Существующие в настоящее время подходы к моделированию переноса [6] ориентированы на вычисление критического показателя и используют гамильтониан сильной связи с диагональным беспорядком. Несмотря на эффективность метода сильной связи, обусловленной разреженностью матрицы, такой подход представляется несколько односторонним. По физическому смыслу он соответствует переносу частиц в связанном состоянии, когда функция Грина экспоненциально уменьшается на среднем расстоянии между частицами. Полученные с помощью гамильтониана сильной связи результаты трудно связать с классическими понятиями теории переноса (длина свободного пробега, коэффициент диффузии), и желательно иметь альтернативный подход.

Существующие подходы к описанию приборов наноэлектроники — квантовых ям, сверхрешеток и т. д., как правило, используют приближение эффективной массы. При этом целый ряд вопросов, например условия шивки на границе двух сред, остаются нерешенными. Можно отказаться от приближения эффективной массы и рассматривать среду как набор потенциалов нулевого радиуса, для которых возможно решение уравнения Шредингера описанным в настоящей работе способом.

2. АЛГОРИТМ РАСЧЕТА

При исследовании мезоскопического транспорта электронов неупругим рассеянием можно пренебречь. Тогда становится возможным решить уравнение Шредингера для задачи рассеяния, когда задается плоская падающая волна и на бесконечности имеется расходящаяся сферическая волна. Мезоскопический транспорт имеет место в полупроводниках и диэлектриках при низких температурах, когда длина волны электрона много больше характерного радиуса потенциала, что позволяет применить приближение потенциалов нулевого радиуса.

Пусть на слой, содержащий N_c точечных рассеивателей, описываемых потенциалами нулевого радиуса, падает плоская волна с волновым вектором \mathbf{k} (мы принимаем $\hbar = m = 1$). Тогда решение стационарного уравнения Шредингера имеет вид суперпозиции падающей волны и расходящихся от каждого рассеивателя сферических волн:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) + \sum_j^{N_c} A_j G(R_j), \quad R_j = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|, \quad (1)$$

где коэффициенты A_j находятся из эффективных граничных условий на поверхности каждого рассеивателя [7]:

$$\left. \frac{\partial \ln(R_j \psi)}{\partial R_j} \right|_{R_j \rightarrow 0} = -\alpha_j. \tag{2}$$

Здесь $1/\alpha_j$ — длина рассеяния на j -ом центре с координатами \mathbf{r}_j , а $G(R) = \exp(ikR)/R$ — функция Грина уравнения Шредингера в пустом пространстве. В расчете мы вынуждены ограничиться рассмотрением падения частицы в направлении оси z по нормали на образец с конечными поперечными размерами $L_x = L_y \simeq (2-4)\lambda$, содержащий N_c хаотически расположенных точечных потенциалов, и использовать периодические пространственные условия для рассеивающей среды. Тогда функция Грина находится суммированием функций Грина для вакуума, смещенных на периоды $L_{x,y}$:

$$G(\mathbf{r}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{mn}|}, \tag{3}$$

$$\mathbf{r}_{mn} = mL_x \mathbf{e}_x + nL_y \mathbf{e}_y.$$

Ряд (3) сходится очень медленно, и в расчете используется его фурье-образ по поперечным координатам. Вблизи рассеивающего центра функция Грина имеет асимптотический вид:

$$G(R_j)|_{R_j \rightarrow 0} = \frac{\exp(ikR_j)}{R_j} + C, \tag{4}$$

где константа C равна сумме ряда (3) без слагаемого с $m, n = 0$ при $\mathbf{r}=0$ и определяется геометрическими размерами $L_{x,y}$ и длиной волны. Оказалось удобным рассчитывать ее в виде разности фурье-образов ряда (3) и функции $\exp(ikr)/r$, что при $\mathbf{r}=0$ дает сходящуюся разность бесконечного интеграла и расходящейся суммы:

$$C = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_x dp_y}{(k^2 - \mathbf{p}^2)^{1/2}} - \frac{2\pi i}{L_x L_y} \sum_{P_x} \sum_{P_y} \frac{1}{(k^2 - \mathbf{P}^2)^{1/2}},$$

$$P_{x,y} = \frac{2\pi n_{x,y}}{L_{x,y}}, \quad P_z, p_z = 0.$$

Подставляя выражение (1) с учетом (4) в соотношение (2), получаем систему комплексных линейных уравнений для N_c коэффициентов A_j , которая решается численно методом Гаусса:

$$(ik + \alpha_j + C)A_j + \sum_{l \neq j}^{N_c} G(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)A_l = -\exp(ikz_j).$$

Коэффициент прохождения T находится следующим образом:

$$T = \frac{1}{kL_x L_y} \int_0^{L_x} \int_0^{L_y} J_z dx dy, \quad \mathbf{J} = \frac{i}{2} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi).$$

Или в окончательной форме:

$$T = 1 + \frac{2\pi}{kL_xL_y} \sum_j^{N_c} (A_j F_j - A_j^* F_j^*),$$

$$F_j = i \exp(-ikz_j) + \frac{2\pi}{L_xL_y} \sum_{P_x}^{|P|<k} \sum_{P_y} \sum_l^{N_c} A_l^* \frac{\exp(i\mathbf{P}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l) - q(z_j - z_l))}{q},$$

$$q = |k^2 - \mathbf{P}^2|^{1/2}.$$

Приближение потенциалов нулевого радиуса дает возможность проводить точное численное решение уравнения Шредингера для достаточно большого числа рассеивателей (мы задавали N_c до 1000), что позволяет моделировать перенос частиц в неупорядоченной среде в довольно широком диапазоне изменения параметров.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Приведенные на рисунках результаты получены усреднением коэффициента прохождения по различным конфигурациям центров рассеяния с одновременной оценкой статистической погрешности. В различных испытаниях при постоянном количестве рассеивающих центров их координаты задавались датчиком случайных чисел. Обычно проводилось несколько сот испытаний.

При заданном значении абсолютной величины длины рассеяния $1/\alpha$ рассматривались три случая: притягивающие центры рассеяния ($\alpha < 0$); отталкивающие ($\alpha > 0$); разноименные центры (знак α_j выбирается случайным образом с равной долей обоих значений). Сечение рассеяния на одиночном центре [7] имеет вид

$$\sigma_{\alpha,k} = 4\pi/(\alpha^2 + k^2). \quad (5)$$

Концентрация рассеивателей n связана с длиной свободного пробега l как

$$n = (\alpha^2 + k^2)/4\pi l,$$

и в качестве определяющих параметров задачи удобно выбрать величины, имеющие размерность длины: λ , $1/\alpha$, l и толщину слоя рассеивателей d . Прозрачность слоя T является функцией только трех независимых безразмерных параметров, к примеру, λ/l , d/l и $\alpha\lambda$ (можно, естественно, брать и другие комбинации).

Нами рассмотрена зависимость прозрачности слоя T от d/l для различных фиксированных значений двух других независимых параметров. Физически это соответствует двум ситуациям: в первом случае при заданных значениях λ , α , d меняется концентрация рассеивателей, т.е. параметр l (фиксированными безразмерными параметрами будут d/λ и $\alpha\lambda$); во втором случае при заданных λ , α , l меняется толщина слоя рассеивателей d (т.е. фиксируются параметры λ/l и $\alpha\lambda$).

В классическом пределе $\lambda/l \rightarrow 0$ перенос частиц описывается кинетическим уравнением с изотропной индикатрисой рассеяния и сечением (5). При $d \ll l$ прозрачность

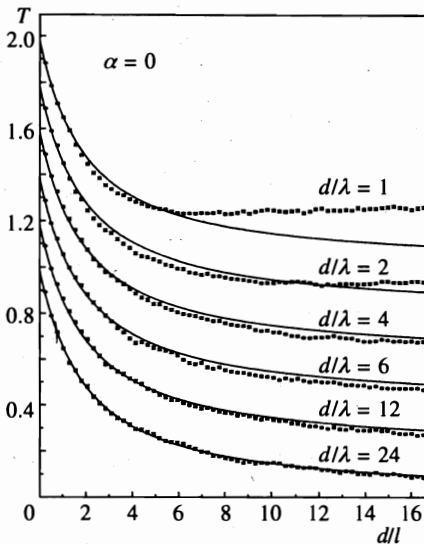


Рис. 1

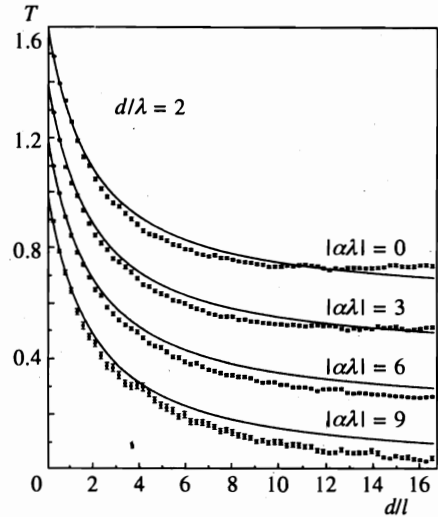


Рис. 2

Рис. 1. Зависимость классической (сплошные линии) и квантовой (точки) прозрачности слоя от плотности рассеивателей с $\alpha = 0$ при фиксированной толщине слоя d для различных длин волны λ (для удобства различные кривые разнесены по оси ординат на 0.2). Здесь и ниже вертикальный размер указывает статистическую погрешность

Рис. 2. Зависимость классической (сплошные линии) и квантовой (точки) прозрачности слоя от плотности разноименных рассеивателей для различных длин рассеяния при фиксированной толщине слоя и длине волны (для удобства кривые разнесены по оси ординат на 0.2)

слоя линейно уменьшается с толщиной, а при $d \gg l$ происходит переход к диффузионному переносу и T пропорционален l/d . Для сравнения с результатами квантовомеханического подхода классический коэффициент прохождения $T_k(d/l)$ находился численно при решении кинетического уравнения методом Монте-Карло.

На рис. 1 и 2 приведены результаты расчетов зависимости T от l при фиксированной толщине слоя d , что удобно для расчетной проверки гипотезы Иоффе—Регеля. При $\lambda/l \ll 1$ классический и квантовый коэффициенты прохождения совпадают в пределах статистической погрешности расчета (рис. 1, нижняя кривая). При увеличении отношения λ/l квантовый коэффициент прохождения сначала становится меньше классического, т. е. интерференция рассеянных волн приводит к уменьшению эффективной длины пробега, что согласуется с теоретическими результатами [8], полученными с помощью диаграммной техники. При $\lambda > (6-7)l$ квантовая прозрачность слоя перестает уменьшаться с увеличением плотности рассеивателей (рис. 1, верхние кривые), что соответствует гипотезе Иоффе—Регеля [1]. Для малых значений $|\alpha\lambda|$ выход прозрачности на постоянное значение с увеличением концентрации рассеивателей наблюдается для всех типов центров, причем в случае отталкивающих центров в достаточно широком диапазоне изменения $\alpha\lambda$ при плотности рассеивателей, соответствующей $\lambda/l \approx 7$, наблюдается минимум прозрачности.

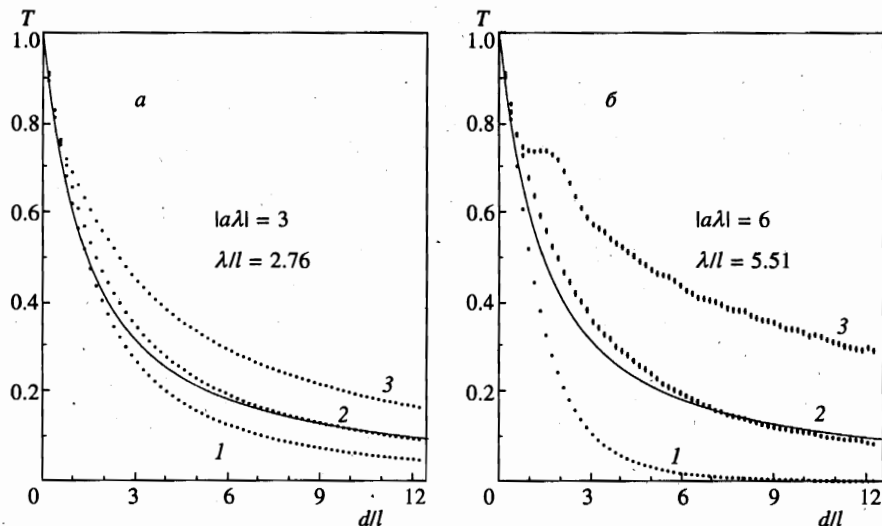


Рис. 3. Зависимость прозрачности от толщины слоя для двух значений длины волны (а, б) при фиксированных длинах рассеяния и свободного пробега для отталкивающих (1), разноименных (2) и притягивающих (3) центров. Сплошные линии — классическая прозрачность слоя при эффективной длине свободного пробега $l_e = 0.77l$

При уменьшении длины рассеяния гипотеза Иоффе—Регеля становится, по-видимому, несправедливой (рис. 2). По крайней мере, при $|\alpha\lambda| \gg 1$ для разноименных рассеивателей квантовый коэффициент прохождения монотонно убывает с ростом d/l и всегда остается меньше рассчитанного в классическом приближении (нижние кривые на рис. 2). Расчеты при $|\alpha\lambda| \gg 1$ показывают, что для всех типов рассеивателей эффективная классическая длина пробега, характеризующая прозрачность слоя, может быть много меньше λ .

Зависимости коэффициента прохождения от толщины слоя при фиксированной плотности рассеивателей приведены на рис. 3 для отталкивающих (кривые 1), разноименных (кривые 2) и притягивающих (кривые 3) центров. С увеличением параметра $|\alpha\lambda|$ различие в поведении кривых 1–3 возрастает. Это хорошо объясняется приближением эффективного потенциала [9], применимым в области значений $k \ll n^{1/3} \ll |\alpha|$, согласно которому влияние рассеивателей эквивалентно наличию среднего потенциала $U = 4\pi n/\alpha$ (или, что то же самое, сдвигу края зоны подвижности внутри слоя на величину U). В этом случае режим прохождения частиц определяется знаком α .

Для отталкивающих центров с увеличением $\alpha\lambda$ и λ/l при выполнении условия $k^2 < U$ происходит переход к режиму туннельного прохождения, когда прозрачность слоя экспоненциально уменьшается с его толщиной (рис. 3, кривые 1).

В случае разноименных центров $U = 0$ и край зоны подвижности в слое не смещен. Режим переноса оказывается близок к диффузионному, и прозрачность слоя приблизительно обратно пропорциональна его толщине (рис. 3, кривые 2). Эффективная длина пробега l_e , при которой классический коэффициент прохождения соответствует кривым 2, оказывается несколько меньше l , соответствующей сечению (5), и существенно меньше λ .

Для притягивающих центров с увеличением $|\alpha\lambda|$ на зависимости прозрачности от

толщины слоя d сначала появляется перегиб (рис. 3, кривые 3), а затем образуются и небольшие локальные максимумы, выраженность которых увеличивается с ростом $|\alpha\lambda|$. Их появление также можно интерпретировать в рамках приближения эффективного потенциала. Притягивающие рассеиватели образуют потенциальную яму, прозрачность которой составляет

$$\left((k/2k_* - k_*/2k)^2 \sin^2(k_*d) + 1 \right)^{-1}$$

и максимальна для резонансных толщин

$$d_m = m\pi/k_*, \quad k_* = \sqrt{k^2 - U}.$$

Это выражение для d_m хорошо описывает положение локальных максимумов на кривой прозрачности при расчетах в области $k \ll n^{1/3} \ll |\alpha|$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод расчета коэффициента прохождения частицы с положительной энергией через слой неупорядоченной среды, основанный на решении трехмерного уравнения Шредингера для многоцентрового рассеяния. Среда представляется в виде набора хаотически расположенных точечных рассеивающих центров, характеризующихся длиной рассеяния $1/\alpha$. В этом приближении получено точное решение уравнения Шредингера для произвольного конечного числа центров.

В классическом пределе $\lambda \ll l$ ($l = 1/n\sigma_{\alpha,k}$), соответствующему малым концентрациям рассеивателей, как и следует ожидать, решения квантовой и классической задач рассеяния практически совпадают.

В расчетах также наблюдается переход к другому предельному случаю при $\lambda \gg \gg l \gg 1/\alpha$, где применимо приближение эффективного потенциала. При этом режим переноса определяется знаком α , что соответствует смещению края зоны подвижности частиц на величину среднего потенциала рассеивателей $U = 4\pi n/\alpha$. Так, для отталкивающих центров прозрачность слоя соответствует туннельному прохождению. В случае разноименных рассеивателей поведение прозрачности близко к классическому режиму диффузионного переноса, причем характерная длина пробега может быть много меньше λ . Наконец, для притягивающих центров прозрачность убывает с толщиной слоя немонотонно, причем положение локальных максимумов прозрачности совпадает с резонансными толщинами потенциальной ямы глубиной U .

При расчетах в переходной области ($\lambda \sim l$, $0 \leq |\alpha\lambda| \lesssim 1$), где приближение эффективного потенциала неприменимо, проведена проверка гипотезы Иоффе—Регеля, согласно которой длина свободного пробега частицы при сколь угодно большой плотности рассеивателей должна оставаться порядка длины волны.

Расчеты показали, что для центров с абсолютной величиной длины рассеяния, большей либо порядка длины волны частицы, гипотеза Иоффе—Регеля подтверждается как при положительной, так и при отрицательной длине рассеяния. При росте концентрации рассеивателей, как притягивающих или отталкивающих, так и разноименных, прозрачность слоя действительно убывает лишь до некоторого постоянного значения, которое достигается при $l \leq (0.15-0.2)\lambda$.

Однако с уменьшением длины рассеяния выход прозрачности на постоянное значение перестает наблюдаться. С ростом параметра $|\alpha\lambda|$ поведение прозрачности слоя постепенно приближается к описываемому эффективным потенциалом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 95-02-04704-А).

Литература

1. A. F. Ioffe and A. R. Regel. *Prog. Semicond.* **4**, 237 (1960).
2. N. F. Mott and E. A. Davis, *Electron processes in non-crystalline materials*, Clarendon Press, Oxford (1979).
3. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
4. К. Б. Ефетов, ЖЭТФ **94**, 357 (1988).
5. Б. Л. Альтшулер, В. Е. Кравцов, И. В. Лернер, ЖЭТФ **91**, 2276 (1986).
6. V. Kramer, K. Broderix, A. Mackinon, and M. Schreiber, *Physica A* **167**, 163 (1990).
7. Ю. Н. Демков, *Метод потенциалов нулевого радиуса*, Изд-во ЛГУ, Ленинград (1975).
8. И. Т. Якубов, ЖЭТФ **58**, 2075 (1970).
9. Б. В. Петухов, В. Л. Покровский, А. В. Чаплик, ЖЭТФ **53**, 1150 (1967).