

КОЭФФИЦИЕНТ ПРОХОЖДЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ СЛУЧАЙНЫЙ ОДНОМЕРНЫЙ ПОТЕНЦИАЛ

В. М. Гаспарян

Развит формализм для вычисления плотности состояний и сопротивления конечных одномерных цепочек произвольных потенциалов без определения собственных функций системы.

В в е д е н и е

Настоящая работа посвящена выводу формулы для сопротивления и плотности состояний одномерных цепочек случайных δ -потенциалов (разделы 1, 2), удобную как для численного счета, так и для исследования особенностей локализации электронов, в одномерном случае во внешнем поле. Это выражение для сопротивления справедливо для цепочек произвольной длины при любом характере беспорядка. При этом не требуется знания точных волновых функций электрона в этом потенциале.

Результаты, приведенные во Введении, опубликованы в [1].

Рассмотрим потенциал типа

$$V(x) = \sum_{i=1}^N V_i \delta(x - x_i), \quad x_i < x_{i+1}, \quad (1)$$

где V_i , x_i — произвольные величины. Функция Грина (ФГ) электрона в такой системе $G(x, x')$ связана с ФГ свободных электронов $G_0(x, x')$ соотношением

$$G(x, x') = G_0(x, x') - R_1 \frac{G_0(x, x_1) G_0(x_1, x')}{G_0(x_1, x_1)}, \quad x, x' \leq x_1, \quad (2)$$

$$G_0(x, x') = \frac{i}{2k} \exp(ik|x - x'|), \quad k = \sqrt{E + i\delta}$$

($\hbar=1$, $m_0=1/2$ — масса электрона). Как мы покажем ниже, коэффициент отражения от такой цепочки представим в виде

$$R \equiv |R_1|^2 = 1 - |D_N|^{-2}, \quad (3)$$

где

$$D_N = \det \left| \delta_{ni} + \frac{iV_i}{2k} \exp(ik|x_i - x_n|) \right|, \quad (4)$$

а коэффициент прозрачности такой цепочки имеет соответственно вид

$$T = 1 - R = |D_N|^2.$$

Согласно Ландауэру [2], сопротивление такой цепочки есть

$$\rho_N = R/T = |D_N|^2 - 1. \quad (5)$$

Плотность состояний при $N \rightarrow \infty$ также можно выразить через величину D_N

$$\nu \equiv -(\pi |x_N - x_1|)^{-1} \int_{x_1}^{x_N} dx \operatorname{Im} G(x, x) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \nu_0 - (\pi |x_N - x_1|)^{-1} \frac{\partial}{\partial E} \ln D_\lambda, \quad (6)$$

где $\nu_0 = 1/2\pi k$ — плотность состояний свободных электронов.

Аналогичное выражение для плотности состояний в одномерной цепочке, состоящей из δ -потенциалов равных амплитуд (т. е. $V_l = V$), получено в [3]. Функция Грина $G(x, x)$, а следовательно и D_N , является аналитической функцией энергии $E = k^2$. Отсюда, используя соотношения (5) и (6), можно получить дисперсионное соотношение типа полученного Гаулессом [4]

$$|x_N - x_1|^{-1} \frac{\partial}{\partial E} \ln (\rho_N(E) + 1) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 2 \int dE' \frac{\nu_E - \nu_0}{E' - E}, \quad (7)$$

связывающее сопротивление данной одномерной цепочки с плотностью состояний.

Дисперсионное соотношение (7) справедливо не только при экспоненциальном росте $\rho_N(E)$ (при $N \rightarrow \infty$) [4], но и при конечных значениях $\rho_N(E)$ (см. (14)).

Детерминант D_N случайной цепочки δ -потенциалов удовлетворяет следующему рекуррентному соотношению:

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2}, \quad (8)$$

где

$$A_N = 1 + \frac{V_N}{V_{N-1}} \exp(2ika_{N-1}) + \frac{iV_N}{2k} [1 - \exp(2ika_{N-1})], \quad N > 1, \\ A_1 = 1 + \frac{iV_1}{2k}, \quad B_N = \frac{V_N}{V_{N-1}} \exp(2ika_{N-1}), \quad (9)$$

D_{N-1} (D_{N-2}) — определитель (4), в котором отсутствуют N -й (и $N-1$ -й) строка и столбец

$$a_{N-1} = |x_N - x_{N-1}|, \quad D_{-1} = 0, \quad D_0 = 1.$$

В модели Кронига—Пенни, когда $V_l = V$ и имеется периодическое расположение потенциалов с периодом a , спектр электрона определяется соотношением

$$\cos \beta a = \operatorname{Re} [e^{-ika} (1 + iV/2k)], \quad (10)$$

где β играет роль квазимпульса. Условие $|\cos \beta a| < 1$ определяет состояние в разрешенной зоне.

В случае обобщенной модели Кронига—Пенни, в которой вместо одного δ -образного потенциала элементарная ячейка содержит m таких потенциалов с произвольными амплитудами V_m , расположенных в произвольных точках x_m , коэффициент прохождения через одну элементарную ячейку в наших обозначениях имеет вид

$$t_m = e^{ikd} D_m^{-1}, \quad T = |t_m|^2, \quad (11)$$

где d — период структуры. Соотношение между коэффициентом прохождения t_m и электронным спектром получено в книге [5]. Используя (11), спектр можно записать в виде

$$\operatorname{Re} (e^{-ikd} D_m) = \cos \beta d. \quad (12)$$

При $n=1$ (12) совпадает с (10). При $n=2$ подстановка (4) в (12) приводит к результату, полученному в [6].

Для конечной цепочки Кронига—Пенни, состоящей из N одинаковых потенциалов V , из (4) получим

$$D_\lambda = e^{iNka} \left[\cos N\beta a + i \left(\frac{V}{2k} \cos ka - \sin ka \right) \frac{\sin N\beta a}{\sin \beta a} \right]. \quad (13)$$

Из (6) и (13) прямо следует, что при $N \rightarrow \infty$, как и следовало ожидать

$$\nu = \frac{1}{\pi} \frac{\partial \beta}{\partial E} \Big|_{\text{Im} \beta \rightarrow +0}.$$

Подставляя (13) в (5), получим, что сопротивление такой цепи имеет вид

$$\rho_N = \left(\frac{V}{2k} \right)^2 \frac{\sin^2 \beta a N}{\sin^2 \beta a} = \rho_1 \frac{\sin^2 \beta a N}{\sin^2 \beta a}. \quad (14)$$

Это выражение описывает граничное сопротивление между периодической структурой и идеальным проводником (ρ_1 — «сопротивление» одной ячейки структуры).

Из (14) видно, что сопротивление такой цепи не растет с ростом N , поэтому удельное сопротивление для состояний в разрешенной зоне при $|\cos \beta a| < 1$ стремится к нулю при $N \rightarrow \infty$. Для состояний в запрещенной зоне, когда $\cos(i\beta a) = \text{ch} \beta a > 1$, сопротивление экспоненциально растет с ростом N .

Рассмотрим теперь случай, когда δ -потенциалы расположены периодически с периодом a , но имеют разные амплитуды V_i . Если $ka = \pi n$ (n — целое), т. е. имеет место резонанс, то из (4) можно получить, что

$$D_N = 1 + i \sum_{l=1}^N \frac{V_l}{2k}, \quad \rho_N = \left(\sum_{l=1}^N \frac{V_l}{2k} \right)^2 = N^2 \frac{\bar{V}^2}{4k^2}, \quad (15)$$

где $\bar{V} = N^{-1} \sum_{l=1}^N V_l$ — среднее значение потенциала в данном образце. Из (15) видно, что при $\langle V \rangle \neq 0$ ρ_N растет пропорционально квадрату длины образца. Формула (15) для ρ_N очень естественна. Она говорит о том, что точное выполнение резонансного условия $ka = \pi n$ эквивалентно тому, что все потенциалы V_l расположены в одной точке.

Для среднего по ансамблю образцов сопротивления из (15) следует

$$\rho_N = \left(\frac{N}{2k} \right)^2 \langle V^2 \rangle + N \frac{\langle V^2 \rangle - \langle V \rangle^2}{4k^2} \quad (16)$$

($\langle \dots \rangle$ означают усреднения по ансамблю). При $\langle V \rangle = 0$ $\rho_N \sim N$, так что длина свободного пробега пропорциональна $k^2 / \langle V^2 \rangle$.

Рекуррентное соотношение (8) удобно для численного решения одномерной цепочки с произвольным потенциалом. Получим асимптотическое выражение для ρ_N при больших значениях случайного потенциала. Пусть $A_1 \approx iV_1/2k$, $A_{N>1} \approx V_N k^{-1} \sin ka e^{ika}$. Тогда рекуррентное соотношение легко решается, так как $D_{N-2} \ll D_N$

$$D_N = \frac{i}{2} \frac{\exp[i(N-1)ka]}{\sin ka} \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^N \prod_{l=1}^N (V_l a). \quad (17)$$

Используя (17), получим для сопротивления цепи выражение, аналогичное результату работы [7]

$$\xi_N + 1 = \frac{1}{4 \sin^2 ka} \left(\frac{\sin^2 ka}{k^2 a^2} \right)^N \prod_{l=1}^N V_l^2 = \frac{1}{4 \sin^2 ka} \exp \left(\frac{N}{\xi} \right),$$

где длина локализации

$$\xi^{-1}(k) = \ln \langle V \rangle^2 a^2 \frac{\sin^2 ka}{k^2 a^2} + N^{-1} \sum_{l=1}^N \ln \frac{V_l^2}{\langle V \rangle^2}.$$

Эта формула справедлива и при $ka \rightarrow 0$, где

$$\xi^{-1}(0) = N^{-1} \sum_{l=1}^N \ln \frac{V_l^2}{\langle V \rangle^2},$$

$\langle V \rangle$ — среднее значение потенциала.

Рассмотрим свойства одномерной цепочки в модели Ллойда [8], когда функция распределения потенциалов есть распределение Коши

$$P(V_n) = \pi^{-1} \frac{\gamma}{(V_n - V)^2 + \gamma^2}.$$

Согласно [8], в этой модели

$$\langle G(x, x) \rangle = G(x, x) |_{V \rightarrow V + i\gamma \operatorname{sign} \operatorname{Im} E},$$

поэтому (см. (6))

$$\langle \ln(\rho_N + 1) \rangle = -2 \operatorname{Re} \left\langle \int_{x_1}^{x_N} dx \int_{-\infty}^E dE' G(x, x'; E') \right\rangle = \ln |\bar{D}_N|^2,$$

где \bar{D}_N — детерминант для модели Кронига—Пенни с заменой всех потенциалов на $V - i\gamma$. Согласно (13), при периодическом расположении потенциалов

$$\bar{D}_N = \exp(iNka) \left\{ \cos N\beta a + i \left[\frac{V - i\gamma}{2k} \cos ka - \sin ka \right] \frac{\sin N\beta a}{\sin \beta a} \right\}, \quad (18)$$

где β определяется соотношением

$$\cos \beta a = \cos ka - \frac{V - i\gamma}{2k} \sin ka.$$

Из (18) и (5) следует, что сопротивление цепочки из N δ -потенциалов имеет вид ($L = aN$)

$$\langle \ln(\rho_N + 1) \rangle = \ln \left(\bar{\rho}_1 \frac{\operatorname{sh}^2 yL + \sin^2 \beta L}{\operatorname{sh}^2 ya + \sin^2 \beta a} + 1 \right), \quad (19)$$

где $y = \operatorname{Im} \beta$, β определяется из уравнения (10),

$$\bar{\rho}_1 = \left| 1 + \frac{V + i\gamma}{2k} \right|^2 - 1.$$

При $L \rightarrow \infty$ из (19) следует, что среднее геометрическое сопротивление экспоненциально растет с ростом длины образца L и при произвольном ka радиус локализации имеет вид [9]

$$\xi^{-1} = \lim_{L \rightarrow \infty} L^{-1} \langle \ln(\rho_N + 1) \rangle = \frac{2}{a} \operatorname{Im} \beta = \frac{2}{a} y = \frac{2}{a} \ln(\sqrt{t+1} + \sqrt{t}),$$

$$2t = \left(\frac{\gamma}{2k} \right)^2 \sin^2 ka - \sin^2 \beta a + \left[\left(\frac{\gamma}{2k} \right)^2 \sin^2 ka - \sin^2 \beta a \right]^2 + \left(\frac{\gamma \sin ka}{k} \right)^2 \Big)^{1/2}.$$

Видно, что при $ka \rightarrow 0$ остается конечным. С другой стороны, при $ka \rightarrow \pi n$ ($n=1, 2, 3, \dots$) ξ стремится к бесконечности. Последний вывод является следствием использованной здесь специфической модели — периодически расположенными рассеивателями, — образующей простую решетку. В несколько обобщенной модели, когда в одной элементарной ячейке имеются два δ -потенциала [10] или же когда к исходному потенциалу добавляется периодическое поле [11], исчезают как особенности в плотности состояний, так и неограниченное возрастание ξ .

1. Вывод основных соотношений

В настоящем разделе мы приведем вывод связи коэффициента отражения линейной цепочки случайных δ -образных потенциалов с детерминантом D_N .

Рассмотрим последовательность δ -потенциалов с произвольными амплитудами V_l , находящихся в произвольных точках x_l (выражение (1)). Если кроме $V(x)$ имеется регулярный потенциал $U(x)$ (внешнее электрическое поле, периодический потенциал и т. д.), то функция Грина электрона удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) + \sum_{l=1}^N V_l \delta(x - x_l) - k^2 \right\} G(x, x'; k) = \delta(x - x'), \quad (20)$$

Уравнение (20) можно записать как уравнение Дайсона

$$G(x, x') + \int dx'' G_0(x, x'') V(x'') G(x'', x') = G_0(x, x'), \quad (21)$$

где $G_0(x, x')$ — ФГ электрона в потенциале $U(x)$.

Для получения явного вида $G(x, x')$ поступим следующим образом. Выделим из потенциала $V(x)$ член, соответствующий крайней правой точке x_N

$$V(x) = V_N \delta(x - x_N) + \sum_{l=1}^{N-1} V_l \delta(x - x_l). \quad (22)$$

Подставляя (22) в (21), получим

$$G(x, x') + \int dx'' G_N(x, x'') \sum_{l=1}^{N-1} V_l \delta(x'' - x_l) G(x'', x') = G_\lambda(x, x'),$$

где

$$\begin{aligned} G_\lambda(x, x') &\equiv G_0(x, x') - V_N \frac{G_0(x, x_N) G_0(x_N, x')}{1 + V_N G_0(x_N, x_N)} = \\ &= G_0(x, x') - r_N \frac{G_0(x, x_N) G_0(x_N, x')}{G_0(x_N, x_N)}, \quad -\infty < x, x' < \infty, \\ r_j &= V_j G_0(x_j, x_j) [1 + V_j G_0(x_j, x_j)]^{-1}, \end{aligned} \quad (23)$$

r_N — комплексная амплитуда отражения электрона от потенциала V_N в отсутствие всех остальных $(N-1)$ левых потенциалов. Если выделить из второго члена выражения (22) следующий $(N-1)$ потенциал, то, повторяя процедуру, получим

$$G(x, x') + \int dx'' G_{N-1}(x, x'') \sum_{l=1}^{N-2} V_l \delta(x'' - x_l) G(x'', x') = G_{N-1}(x, x').$$

Здесь

$$G_{N-1}(x, x') = G_\lambda(x, x') - R_{N-1}^{\leftarrow} \frac{G_N(x, x_{N-1}) G_N(x_{N-1}, x')}{G_N(x_{N-1}, x_{N-1})}, \quad x_{N-1} \leq x, x' \leq x_N, \quad (24)$$

где

$$R_{N-1}^{\leftarrow} = \frac{V_{N-1}^{\leftarrow} G_N(x_{N-1}, x_{N-1})}{1 + V_{N-1} G_N(x_{N-1}, x_{N-1})} = \frac{r_{N-1} (1 - r_N z_{N-1, N})}{1 - r_N r_{N-1} z_{N-1, N}} \quad (25)$$

— амплитуда отражения от $(N-1)$ центра; стрелка указывает направление падающей волны. Величина R_{N-1}^{\leftarrow} отличается от r_{N-1} тем, что в ней учтен δ -образный потенциал в точке x_N . Величина $z_{N-1, N}$ в (25) определяется выражением

$$z_{N-1, N} = \frac{G_0(x_{N-1}, x_N) G_0(x_N, x_{N-1})}{G_0(x_N, x_N) G_0(x_{N-1}, x_{N-1})}. \quad (26)$$

Используя соотношение, связывающее $G(x, x')$ с одноточечными ФГ при совпадающих одномерных координатах [12]

$$G(x, x') = \{G(x, x) G(x', x')\}^{1/2} \exp \left\{ - \int_{\min(x, x')}^{\max(x, x')} \frac{dx_1}{2G(x_1, x_1)} \right\},$$

получим

$$z_{N-1, N} = \exp \left\{ - \int_{x_{N-1}}^{x_N} \frac{dx}{G_0(x, x)} \right\} = z_{N, N-1}.$$

Выразим теперь $G_{N-1}(x, x')$ при $x, x' \leq x_{N-1}$ через затравочную ФГ $G_0(x, x')$ и R_{N-1}^{\rightarrow}

$$G_{N-1}(x, x') = G_0(x, x') - R_{N-1}^{\rightarrow} \frac{G_0(x, x_{N-1}) G_0(x_{N-1}, x')}{G_0(x_{N-1}, x_{N-1})} \quad (27)$$

и, приравнявая (24) и (27) при $x = x' = x_{N-1}$, для R_{N-1}^{\rightarrow} получим

$$R_{N-1}^{\rightarrow} = [r_{N-1} + r_N (1 - 2r_{N-1}) z_{N-1, N}] [1 - r_N r_{N-1} z_{N-1, N}]^{-1}.$$

Повторяя эту процедуру N раз, получим ФГ на интервале $[x_1, x_2]$ при учете всех δ -потенциалов в виде

$$G(x, x') = G_1(x, x') - R_1 \frac{G_1(x_1, x_1) G_1(x_1, x')}{G_1(x_1, x_1)}, \quad (28)$$

где R_1 — амплитуда отражения от первого центра при наличии всех остальных центров:

$$R_1 = \frac{r_1 (1 - R_2 z_{1, 2})}{(1 - r_1 R_2 z_{1, 2})},$$

$$G_1(x, x') = G_0(x, x') - R_2 \frac{G_0(x, x_2) G_0(x_2, x')}{G_0(x_2, x_2)}.$$

С другой стороны, при $x, x' \leq x_1$ имеем

$$G(x, x') = G_0(x, x') - R_1 \frac{G_0(x, x_1) G_0(x_1, x')}{G_0(x_1, x_1)}. \quad (29)$$

Приравнявая (28) и (29) при $x = x' = x_1$, получим

$$R_1^{\rightarrow} = \frac{r_1 + z_{1, 2} R_2 (1 - 2r_1)}{1 - z_{1, 2} r_1 R_2} = -\frac{A}{B}. \quad (30)$$

Величина R_1 и есть интересующая нас амплитуда отражения электрона от цепочки потенциалов, непосредственно связанная с сопротивлением формулой Ландауэра [2].

Числитель и знаменатель (30) можно представить в виде детерминантов

$$B = \det \hat{B} = \begin{vmatrix} 1 & R_2 \\ r_1 & z_{1, 2}^{-1} \end{vmatrix}, \quad A = \det \hat{A} = \begin{vmatrix} 0 & r_1 & R_2 \\ 1 & 1 & R_2 \\ 1 & r_1 & z_{1, 2}^{-1} \end{vmatrix}. \quad (31)$$

Из (31) видно, что матрица \hat{A} получается из матрицы \hat{B} окаймлением слева и сверху. Снова подставляя в (31) выражение для R_2 , аналогичное (30), и повторяя так N раз, получим выражение для \hat{A} и \hat{B} через r_j и $z_{j, j+1}$

$$R_1 = -\frac{\det \hat{D}_{N+1}}{\det \hat{D}_N} = -\frac{\hat{D}_{N+1}}{\hat{D}_N}, \quad (32)$$

где матрица \hat{D}_N определяется выражением

$$(\hat{D}_N)_{nl} = \delta_{nl} + V_l G_0(x_l, x_l) z_{n, l}^{1/2}, \quad (33)$$

а матрица \hat{D}_{N+1} получается из \hat{D}_N окаймлением слева и сверху

$$(\hat{D}_{N+1})_{n+1, l+1} = (\hat{D}_N)_{n, l}, \quad (\hat{D}_{N+1})_{1, 1} = 0,$$

$$(\hat{D}_{N+1})_{n, 1} = z_{n-1, 1}^{1/2}, \quad (\hat{D}_{N+1})_{1, n} = V_{n-1} G_0(x_{n-1}, x_{n-1}) z_{n-1, 1}^{1/2}. \quad (34)$$

Докажем теперь формулу (3) методом математической индукции. Можно непосредственно проверить, что при $N=1$

$$R \equiv |R_1|^2 = |r_1|^2 = 1 - |D_1|^{-2}.$$

Предположим теперь, что соотношение

$$R = 1 - |D_N|^{-2}, \quad T = |D_N|^2 \quad (3.)$$

справедливо при некотором N , и покажем, что из этого следует его справедливость при замене N на $N+1$. Если выделить потенциал первого центра $V_1 \delta(x-x_1)$, то определители D_{N+1} и \bar{D}_{N+2} можно выразить через определитель D_1 , определяемый первым центром, и определители \bar{D}_N , \bar{D}_{N+1} , относящиеся к оставшейся цепочке из N потенциалов $V_l \delta(x-x_l)$, $2 \leq l \leq N+1$

$$D_{N+1} = D_1 D_N \begin{vmatrix} 1 & R_2 z_{1,2}^{1/2} \\ r_1 z_{1,2}^{1/2} & 1 \end{vmatrix}, \quad \bar{D}_{N+2} = D_1 D_N \begin{vmatrix} 0 & r_1 & R_2 z_{1,2}^{1/2} \\ 1 & 1 & R_2 z_{1,2}^{1/2} \\ z_{1,2}^{1/2} & r_1 z_{1,2}^{1/2} & 1 \end{vmatrix}. \quad (36)$$

Совокупность формул (32) и (36) эквивалентна (31). Вычисляя определители (36) для D_{N+1} и \bar{D}_{N+2} , получим

$$|D_{N+1}| = |(1 - r_1 R_2 z_{1,2}) t_1^{-1} T_2^{-1}|, \\ |\bar{D}_{N+2}| = |[r_1 + R_2(1 - 2r_1) z_{1,2}] t_1^{-1} T_2^{-1}|. \quad (37)$$

Из выражения (23) для r_1 и того факта, что ФГ $G_0(x, x)$ в непрерывном спектре чисто мнимая, следует

$$r_1 + r_1^* = 2|r_1|^2.$$

Тогда выражение (37) для $|\bar{D}_{N+2}|^2$ можно представить в виде

$$|\bar{D}_{N+2}|^2 = -1 + |D_{N+1}|^2. \quad (38)$$

Из (38) и (32) непосредственно следует, что соотношение (35) выполняется для цепочки из $N+1$ рассеивающего центра. Из (33) и (34) можно получить рекуррентное соотношение для

$$D_N = A_N D_{N-1} - B_N D_{N-2}, \quad (39) \\ \bar{D}_{N+1} = \frac{1 - V_1 G_0(x_1, x_1)}{V_1 G_0(x_1, x_1)} D_N - \frac{D_{-1+N}}{V_1 G_0(x_1, x_1)}, \quad (40)$$

где

$$A_N = 1 + \frac{V_N G_0(x_N, x_N)}{V_{N-1} G_0(x_{N-1}, x_{N-1})} z_{N-1, N} + V_N G_0(x_N, x_N) (1 - z_{N-1, N}), \quad N > 1,$$

$$A_1 = 1 + V_1 G_0(x_1, x_1), \quad B_N = \frac{V_N G_0(x_N, x_N)}{V_{N-1} G_0(x_{N-1}, x_{N-1})} z_{N-1, N},$$

$D_{N-(N-2)}$ — определитель (33), в котором отсутствуют N -й (и $N-1$ -й) строка и столбец; D_{-1+N} — определитель (33), в котором отсутствуют 1-й строка и столбец; $D_0=1$, $D_{-1}=0$. В частности, при $G_0(x, x) = i/2k$, т. е. когда $V(x)=0$, из (39) получается рекуррентное соотношение (8).

2. Локальная плотность состояний

Знание явного вида $\nu(E, x)$ локальной плотности электронных состояний с энергией E в точке x в одномерной цепочке случайных δ -потенциалов при любом характере беспорядка представляет определенный интерес. Это связано с тем, что флуктуации локальной плотности состояний электронов приводят к флуктуациям сдвигов Найта, т. е. к неоднородному уширению линии ядерного магнитного резонанса.

Для вычисления локальной плотности состояний в цепочке конечной длины нам достаточно знать явный вид ФГ $G(x, x')$, удовлетворяющий

уравнению (2), в каждой ячейке $x_n \leq x, x' \leq x_{N+1}$ при заданном числе N рассеивающих центров. Для этого нам необходимо повторить вышеописанную процедуру с выделением из потенциала $V(x)$ (1) δ -потенциалов не в порядке их убывания, что привело к формулам (28), (20), а так, чтобы на последнем, N -м, шагу подойти к заданному n -му потенциалу справа. Тогда мы получаем для ФГ следующее выражение (ср. с (28)):

$$G(x, x') = G_n(x, x') - \tilde{R}_n \frac{G_n(x, x_n) G_n(x_n, x')}{G_n(x_n, x_n)}, \quad (41)$$

где

$$G_n(x, x') = G_0(x, x') - R_{\bar{n}+1} \frac{G_0(x, x_{n+1}) G_0(x_{n+1}, x')}{G_0(x_{n+1}, x_{n+1})}. \quad (42)$$

При $x=x'$ из (41) с учетом (42) получаем выражение для ФГ при совпадающих координатах

$$G(x, x) = \frac{G_0(x, x)}{1 - R_n R_{\bar{n}+1} z_{n, n+1}} \{1 + R_n R_{\bar{n}+1} z_{n, n+1} - R_{\bar{n}+1} z_{x, n+1} - R_n z_{n, x}\}. \quad (43)$$

Здесь $z_{x, n+1}$ ($z_{n, x}$) выражается формулой (26) с переменным нижним (верхним) пределом; \tilde{R}_n — амплитуда отражения от левого блока, содержащего n центров при наличии правого блока, содержащего $(N-n)$ центров

$$\tilde{R}_n = \frac{R_n (1 - R_{\bar{n}+1} z_{n, n+1})}{1 - R_n R_{\bar{n}+1} z_{n, n+1}}, \quad (44)$$

R_n — амплитуда отражения от левого блока, содержащего n центров при отсутствии правого блока; $R_{\bar{n}+1}$ — амплитуда отражения от правого блока, содержащего $(N-n)$ центров, при отсутствии левого блока. Амплитуда $R_{\bar{n}+1}$ получается из (32) вычеркиванием из D_N первых n строк и n столбцов

$$R_{\bar{n}+1} = - \frac{\det \hat{D}_{-n+1, +1}}{\det \hat{D}_{-n, N}} = - \frac{\hat{D}_{-n+1, N+1}}{D_{-n, N}}. \quad (45)$$

Что касается R_n , то ее структура аналогична (32), т. е.

$$R_n = - \frac{\det \hat{D}_{n+1}^0}{\det \hat{D}_n} = - \frac{\hat{D}_{n+1}^0}{D_n}. \quad (46)$$

Однако матрица \hat{D}_{n+1}^0 получается из D_n окаймлением его справа и снизу

$$\begin{aligned} (\hat{D}_{N+1}^0)_{n, l} &= (\hat{D}_N)_{n, l}, & (\hat{D}_{N+1}^0)_{N+1, N+1} &= 0, \\ (\hat{D}_{N+1}^0)_{N+1, n} &= V_n G_0(x_n, x_n) z_{N+1, n+1}^{1/2}, & (\hat{D}_{N+1}^0)_{n, N+1} &= z_{n+1, N+1}^{1/2}. \end{aligned}$$

Для \hat{D}_{n+1}^0 имеет место следующее рекуррентное соотношение:

$$\hat{D}_{n+1}^0 = \frac{1 - V_n G_0(x_n, x_n)}{|V_n G_0(x_n, x_n)|} D_n - \frac{D_{n-1}}{V_n G_0(x_n, x_n)}. \quad (47)$$

Заметим, что хотя формулы (41)–(46) справедливы в заданном интервале $[x_n, x_{n+1}]$, но тем не менее из них формально может быть получено и ФГ как при $x, x' \leq x_1$, так и при $x, x' \geq x_N$: а) при $n=0$ из (41) с учетом (42) и (44) мы получаем (29), так как $R_0 \equiv 0, \tilde{R}_0=0$; б) при $n=N$ из (41) с учетом (42), (44) и (45) мы получаем

$$G(x, x') = G_0(x, x') - R_N \frac{G_0(x, x_N) G_0(x_N, x')}{G_0(x_N, x_N)},$$

так как $R_{\bar{N}+1} \equiv 0, \tilde{R}_N = R_N$.

По определению, локальная плотность состояний есть

$$\nu(E, x) = \frac{\text{Im}}{\pi} G(x, x) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{G_0(x, x)}{D_{\Lambda} V_n^2 G_0^2(x_n, x_n)} \left\{ (D_n - D_{n-1})(D_{-(n-1)+N} - D_{-n+N}) - \right. \\ \left. - V_n G_0(x_n, x_n) \left\{ \left(1 - \cos \int_{x_n}^x \frac{idt}{G_0(it)} \right) [2V_n G_0(x_n, x_n) D_n D_{-n+N} - \right. \right. \\ \left. \left. - (D_n - D_{n-1}) D_{-n+N} - (D_{-(n-1)+N} - D_{-n+N}) D_n] - \right. \right. \\ \left. \left. - i \sin \int_{x_n}^x \frac{idt}{G_0(it)} [(D_n - D_{n-1}) D_{-n+N} - (D_{-(n-1)+N} - D_{-n+N}) D_n] \right\} \right\}. \quad (48)$$

При выводе (48) мы исходили из (43) и использовали рекуррентные соотношения (39), (40) и (47). В частности, если $G_0(x, x) = i/2k$ и имеет место резонанс, т. е. D_n определяется формулой (15), из (48) при $x = x_n$ получаем

$$\nu(E, x_n) = \frac{1}{2\pi k} \frac{1}{1 + \left(\sum_{l=1}^N \frac{V_l}{2k} \right)^2}.$$

Видно, что при точном выполнении резонанса, т. е. при $ka = \pi n$, локальная плотность состояний не зависит от номера узла.

Локальная плотность состояний при больших значениях случайного потенциала V_n и при $x = x_n$, когда D_n определяется формулой (17), имеет вид

$$\nu(E, x_n) \approx 2k/\pi V_n^2.$$

3. Сопротивление последовательно соединенных блоков

Рассмотрим теперь две цепочки (I и II), содержащие n и m произвольных δ -потенциалов соответственно и соединенных последовательно. Пусть фаза, набираемая волной между этими цепочками, равна φ . Тогда (см. (36))

$$D_{n+m} = D_n D_m \begin{vmatrix} 1 & R_{\text{II}} e^{i\varphi} \\ R_{\text{I}} e^{i\varphi} & 1 \end{vmatrix},$$

где R_{I} (R_{II}) — амплитуда отражения от области, содержащей n (m) рассеивателей

$$\frac{1}{T_{n+m}} = |D_{n+m}|^2 = \frac{1 + |R_{\text{I}}|^2 |R_{\text{II}}|^2 - 2 |R_{\text{I}}| |R_{\text{II}}| \cos \theta}{|T_{\text{I}}| |T_{\text{II}}|},$$

$\theta = 2\varphi + \theta_{\text{I}} + \theta_{\text{II}}$; θ_{I} (θ_{II}) — фаза, набираемая волной при прохождении области I (II).

Вычислим величину $\langle \ln(\rho_{\text{I+II}} + 1) \rangle$, где $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по фазе θ в интервале $[0, 2\pi]$

$$\langle \ln(\rho_{\text{I+II}} + 1) \rangle = \langle \ln T_{n+m} \rangle = \langle \ln T_{\text{I}} \rangle + \langle \ln T_{\text{II}} \rangle - \\ - \langle \ln(1 + |R_{\text{I}}|^2 |R_{\text{II}}|^2 - 2 |R_{\text{I}}| |R_{\text{II}}| \cos \theta) \rangle,$$

последний член равен нулю, а поэтому [13]

$$\langle \ln(\rho_{\text{I+II}} + 1) \rangle = \langle \ln(\rho_{\text{I}} + 1) \rangle + \langle \ln(\rho_{\text{II}} + 1) \rangle. \quad (49)$$

Если же интересоваться сопротивлением блока $\bar{\rho}_n$, содержащего n центров и входящего в общую цепочку из N рассеивателей, то его можно

найти из (44), так как \tilde{R}_n есть амплитуда отражения от левого блока при наличии правого блока

$$|\tilde{R}_n|^2 = \frac{\tilde{\rho}_n}{1 + \tilde{\rho}_n} = \frac{\rho_n (\rho_{-n+N} + 1) \left(1 + \frac{\rho_{-n+N}}{1 + \rho_{-n+N}} - 2 \sqrt{\frac{\rho_{-n+N}}{1 + \rho_{-n+N}} \cos \theta} \right)}{1 + \rho_n}. \quad (50)$$

Здесь ρ_n, ρ_{-n+N} — сопротивления отдельных блоков; ρ_N — сопротивление всей цепочки; $\theta = 2\varphi + \theta_1$; θ_1 — фаза, набираемая волной при прохождении левого блока; φ — фаза, набираемая волной между левым и правым блоками. Поступая так же, как и при нахождении выражения (49), для (50) будем иметь

$$\langle \ln (\rho_N + 1) \rangle = \langle \ln \rho_n \rangle + \langle \ln (\rho_{-n+N} + 1) \rangle - \left\langle \ln \frac{\tilde{\rho}_n}{1 + \tilde{\rho}_n} \right\rangle.$$

Я глубоко благодарен моим соавторам Б. Л. Альтшулеру, А. Г. Аронову и З. А. Касаманяну за совместную работу [1], основные результаты которой изложены во Введении этой статьи.

Л и т е р а т у р а

- [1] Gasparian V. M., Altshuler B. L., Aronov A. G., Kasamianian Z. H. // Phys. Lett. In press. 1988.
- [2] Landauer R. // Phys. Lett. 1981. V. 85A. N 2. P. 91—93.
- [3] Бычков Ю. А., Дыхне А. М. // Письма в ЖЭТФ. 1966. Т. 3. № 4. С. 313—316.
- [4] Thouless D. J. // Phys. Reports. 1974. V. 13. N 1. P. 93—98.
- [5] Хейне В., Коэн Н., Уэйр Д. Теория псевдопотенциалов. М., 1973.
- [6] Eldib A. M., Hassan H. F., Mohamed M. A. // J. Phys. C (Sol. St. Phys.). 1987. V. 20. N 16. P. 3011—3019.
- [7] Ицкович И. Ф., Кулик И. О., Шехтер Р. И. // ФНТ. 1987. Т. 13. № 11. С. 1166—1177.
- [8] Лифшиц И. М., Гредескул С. А., Пастур Л. А. Введение в теорию неупорядоченных систем. М., 1982.
- [9] Hirota T., Ishii K. // Progr. Phys. 1971. V. 145, N 5. P. 1713—1715.
- [10] Костадинов И. З. // Письма в ЖЭТФ. 1975. Т. 21. № 2. С. 105—107.
- [11] Касаманян З. А. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 7. С. 281—285.
- [12] Касаманян З. А. // Изв. вузов, физика. 1979. № 11. С. 20—24.
- [13] Anderson P. W., Thouless D. J., Abrahams E., Fisher D. S. // Phys. Rev. 1980. V. B22. N 8. P. 3519—3526.

Ереванский государственный университет
Ереван

Поступило в Редакцию
19 сентября 1988 г.