Письма в ЖЭТФ, том 37, вып.11, стр. 539 – 542 *5 июня 1983 г.*

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ПРОХОЖДЕНИИ ЭЛЕКТРОНА ЧЕРЕЗ ОДНОМЕРНУЮ ЦЕПОЧКУ СЛУЧАЙНО РАСПОЛОЖЕННЫХ ЦЕНТРОВ

В.И.Перель, Д.Г.Поляков

В коротковолновом пределе найдено распределение вероятностей для волновой функции электрона, движущегося через неупорядоченную, одномерную цепочку рассеивающих центров.

Речь идет о следующей задаче. Имеется уравнение

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2}+[k^2-2V(z)]\Psi(z)=0,$$

где $V(z)$ – потенциал, созданный случайно расположенными центрами. В промежутках между центрами волновая функция имеет вид

$$\Psi(z)=a_+e^{ikz}+a_-e^{-ikz}=\Psi_+(z)+\Psi_-(z).$$

Рассеяние на центре характеризуется линейным преобразованием

$$a_+=\alpha_1\widetilde{a}_++\beta_1\widetilde{a}_-e^{-2ikz_1},\ a_-=\beta_1^*\widetilde{a}_+e^{2ikz_1}+\alpha_1^*\widetilde{a}_-,\qquad |\alpha_1|^2-|\beta_1|^2=1,\tag{1}$$

где $a_\pm$ и $\widetilde{a}_\pm$ – амплитуды волновых функций соответственно справа и слева от центра. Коэффициенты α_1 и β_1 не зависят от координаты центра z_1. Для значений волновой функции на входе $(z=0)$ и выходе цепочки длиной z имеет место соотношение

$$\Psi_+(z)=\alpha\overline{\Psi}_+(0)+\beta\Psi_-(0),\quad \Psi_-(z)=\beta^*\Psi_+(0)+\alpha^*\Psi_-(0),\quad |\alpha|^2-|\beta|^2=1\tag{2}$$

Коэффициенты α,β зависят от конкретной реализации распределения центров по цепи и в этом смысле являются случайными величинами. Задача состоит в том, чтобы найти для них распределение вероятностей.

Этому вопросу посвящено много работ в связи с проблемой андерсоновской локализации, причем наибольший интерес вызывает коротковолновый предел (большие k). Некоторые результаты для средних значений известны (см., например, [1-6] и обзор [7], посвященный близким вопросам). Мельников [5] нашел полное решение задачи в случае слабого рассеяния на отдельном центре ($|\beta_1|\ll 1$) (см. также [1,3], где приведено решение для потенциала типа гауссового белого шума). Ниже получено общее решение в коротковолновом пределе.

Введем плотность вероятности $W(\mathbf{a},z)$ того, что в точке z вектор $\mathbf{a}=(\mathrm{Re}\,a_+,\ \mathrm{Im}\,a_+,\ \mathrm{Re}\,a_-,\ \mathrm{Im}\,a_-)$ принимает заданное значение при условии, что в точке $z=0$ он имеет значение $\mathbf{a}_0$. Для нее имеется очевидное уравнение

$$\frac{\partial W(\mathbf{a},z)}{\partial z}=n[\widetilde{W}(\mathbf{a},z)-W(\mathbf{a},z)],\tag{3}$$

где n – концентрация центров, $\widetilde{W}(\mathbf{a},z)=W(\widetilde{\mathbf{a}},z)$, а $\widetilde{\mathbf{a}}$ связано с $\mathbf{a}$ соотношением (1). Это уравнение точное, так как вероятности нахождения центра в точке z и того, что слева от центра амплитуда имеет определенное значение – независимы. Граничные условия к этому уравнению можно ставить только на левом конце цепи $(z=0)$. Перейдем к новым переменным ρ_+,ρ_-,ϕ,χ согласно формуле $\Psi_\pm=\rho_\pm\exp[i(\chi\pm\phi)]$. Тогда уравнение (3) примет вид

$$\frac{\partial W}{\partial z}+k\frac{\partial W}{\partial\phi}=n(\widetilde{W}-W).\tag{4}$$

Отметим, что связь между $\widetilde{\Psi}_\pm$ и $\Psi_\pm$ не содержит координаты центра. Нетрудно показать, что $\widetilde{\chi}-\chi$ не зависит от χ, так что (4) после усреднения по χ сохраняет свой вид. Ниже под W понимается вероятность, усредненная по χ. В пределе больших k можно искать W в виде разложения: $W=W^{(0)}+W^{(1)}/k+\ldots$. В нулевом приближении $\partial W^{(0)}/\partial\phi=0$, а условие разрешимости первого приближения приводит к уравнению

$$\frac{\partial W^{(0)}}{\partial z}=n\int_0^{2\pi}\frac{d\phi}{2\pi}(\widetilde{W}^{(0)}-W^{(0)}).\tag{5}$$

Вероятность $W^{(0)}$ зависит только от ρ_+ и ρ_-. Однако $\rho_-^2 - \rho_+^2 = J$ есть, согласно (2), сохраняющаяся величина (поток). Поэтому можно записать $W^{(0)} = \delta(J - J_0) F(I, z)$, где $I = \rho_-^2 + \rho_+^2$. Будем искать F для граничных условий частного вида $J_0 = 0$, $I_0 = 1$, – как будет видно, этого достаточно для полного решения поставленной в начале статьи задачи (отметим, что при таких условиях функция F описывает распределение электронной плотности локализованного состояния). Из уравнений (1), (5) находим

$$\frac{\partial F(I, z)}{\partial z} = n \int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{2\pi} \left[F(qI, z) - F(I, z) \right]. \tag{6}$$

Здесь $q = \gamma_1 + \sqrt{\gamma_1^2 - 1}\,\cos\psi$, $\gamma_1 = |\alpha_1|^2 + |\beta_1|^2 = 1 + 2R_1/T_1$; R_1, T_1 – коэффициенты отражения и прохождения при рассеянии электрона на центре. Из уравнения (6) легко получить

$$\int_0^\infty dI\, I^s F(I, z) = \exp\left\{ [P_s(\gamma_1) - 1]\, nz \right\}, \tag{7}$$

где P_s – функция Лежандра (с помощью обратного преобразования Меллина отсюда можно найти $F(I, z)$, но наша цель состоит не в этом). Покажем, что результат (7) позволяет получить полное решение для распределения вероятности матрицы перехода (2). Эта матрица содержит три независимых параметра, в качестве которых выберем $\gamma = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 + 2R/T$ (R, T – коэффициенты отражения и прохождения для всей цепочки) и фазы коэффициентов α и β. Подлежащей определению статистической характеристикой матрицы перехода через цепочку является плотность вероятности $w(\gamma, z)$. Очевидно, что $F(I, z)$ выражается через $\omega(\gamma, z)$:

$$F(I, z) = \int_0^{2\pi} \frac{d\psi}{2\pi} \int_1^\infty d\gamma\, w(\gamma, z)\, \delta\left(I - I(\gamma, \psi, J_0, I_0)\right), \tag{8}$$

где $I(\gamma, \psi, J_0, I_0) = \gamma I_0 + \sqrt{\gamma^2 - 1}\,\sqrt{I_0^2 - J_0^2}\,\cos\psi$ есть сумма $|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2$, записанная через начальные значения J_0, I_0 с помощью преобразования (2). Полагая здесь $J_0 = 0$, $I_0 = 1$, умножая (8) на I^s, интегрируя по I и используя (7), получаем для $w(\gamma, z)$ интегральное уравнение

$$\int_1^\infty d\gamma\, w(\gamma, z) P_s(\gamma) = \exp\left\{ [P_s(\gamma_1) - 1]\, nz \right\}. \tag{9}$$

Оно решается посредством преобразования Мелера – Фока [8]:

$$w(\gamma, z) = \int_0^\infty dt\, P_{-\frac{1}{2} + it}(\gamma)\, t\, \mathrm{th}(\pi t) \exp\left\{ [P_{-\frac{1}{2} + it}(\gamma_1) - 1]\, nz \right\}. \tag{10}$$

Формула (10) и дает решение поставленной задачи.

Из (9) легко находятся средние для целых степеней γ (полагая $s = 1, 2, \ldots$) и для $\ln[(\gamma + 1)/2] = \ln(1/T)$ (дифференцируя по s и устремляя s к -0):

$$\langle \gamma \rangle = 2 \langle 1/T \rangle - 1 = \exp[(2R_1/T_1)\, nz], \quad \langle \ln(1/T) \rangle = nz \ln(1/T_1).$$

Умножая (10) на $T = 2/(\gamma + 1)$ и интегрируя, получаем общее выражение для среднего коэффициента прохождения через цепь

$$\langle T \rangle = 2\pi \int_0^\infty dt\, t\, \frac{\mathrm{th}(\pi t)}{\mathrm{ch}(\pi t)} \exp\left\{ [P_{-\frac{1}{2} + it}(\gamma_1) - 1]\, nz \right\}.$$

Для слабого рассеяния и потенциала типа белого шума из приведенных формул следуют известные результаты [1-5] (при этом распределение (10) переходит в распределение [1,3,5]).

Из (10) легко получаются и другие предельные случаи: $R_1 \to 1$, большие z и т.д. При подстановке R_1 и T_1, соответствующих δ-образным центрам, формулы для $\langle 1/T \rangle$ и $\langle \ln(1/T) \rangle$ совпадают с полученными в работе [6], где рассеяние не предполагалось слабым.

Отметим некоторые точные результаты, следующие из (3) при произвольных k. Умножая (3) на $|a_+|^2$, $|a_-|^2$, $(a_+ a_-^*)$ можно получить замкнутую систему дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами для соответствующих средних значений. Полагая все средние $\propto \exp(\nu n z)$ находим характеристическое уравнение $\nu^3 + \delta\nu^2 + [\delta + 4k^2 n^{-2} + 8(\mathrm{Re}\,\alpha_1)(\mathrm{Im}\,\alpha_1) k n^{-1}]\nu - 8|\beta_1|^2 k^2 n^{-2} = 0$, $\delta = 4 - 4(\mathrm{Re}\,\alpha_1)^2$. При граничных условиях $|a_{+0}| = 0$, $|a_{-0}| = 1$ величина $|a_-|^2$ равна $1/T$. Таким образом, $\langle 1/T \rangle$ можно найти точно при произвольных z и k. Заметим, что зависимость $\langle 1/T \rangle$ от z содержит осциллирующие члены. Корень характеристического уравнения, для которого $\mathrm{Re}\,\nu$ максимально, определяет поведение $\langle 1/T \rangle$ при больших z: $\langle 1/T \rangle \propto \propto \exp(z/l)$. В простом случае δ-образных центров $1/l = 2(k_b^2 n)^{1/3}$ при $|k_b + k^2/n| \ll \ll |k_b (k_b/n)^{1/3}|$ и $1/l = 2k_b^2/(2k_b + k^2/n)$ при выполнении обратного неравенства и $2k_b + k^2/n > 0$ ($-\hbar^2 k_b^2/2m$ – энергия связанного или виртуального состояния в поле одиночного центра). В коротковолновом пределе ($kl \gg 1$, $|k_b|\, l \gg 1$) $1/l = 2nk_b^2/k^2 = 2nR_1/T_1$.

Литература

1. *Лифшиц И.М., Гредескул С.А., Пастур Л.А.* Введение в теорию неупорядоченных систем, М.: Наука, 1982.
2. *Abrikosov A.A., Ryzhkin I.A.* Adv. Phys., 1978, 27, 147.
3. *Abrikosov A.A.* Sol. St. Comm., 1981, 37, 997.
4. *Anderson P.W., Thouless D.J., Abrahams E., Fisher D.S.* Phys. Rev., 1980, B22, 3519.
5. *Мельников В.И.* ФТТ, 1981, 23, 782.
6. *Sak J., Kramer B.* Phys. Rev., 1981, B24, 1761.
7. *Gogolin A.A.* Phys. Rep., 1982, 86, 3.
8. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции, 1, М.: Наука, 1973, 177.

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
20 апреля 1983 г.