

УДК 621.315.592

ДВУХУРОВНЕВАЯ КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ ЭЛЕКТРОНА В ДВУМЕРНОЙ СИСТЕМЕ

А. Г. Миронов, М. Г. Новак

(кафедра физики полупроводников)

В настоящей работе метод исследования [1] энергетического спектра в области хвоста плотности состояний двумерной системы используется для анализа квантовой корреляции между энергетическими уровнями. Под этим понимается известный эффект отталкивания уровней при сближении центров локализации; во флуктуационной области спектра этот эффект требует специального рассмотрения. Отличительной особенностью данной системы является необходимость привлечения для описания ее статистических характеристик отвечающего ей случайного поля.

1. **Введение.** Для описания величин, зависящих от характеристик сразу двух уровней, плотности состояний, полученной в [2], оказывается недостаточной.

Необходимо ввести плотность вероятности того, что вблизи точек R_1 и R_2 возникнут потенциальные ямы, содержащие соответственно уровни в интервалах ΔE_1 и ΔE_2 около точек E_1 и E_2 . Обозначим эту величину через $p_2(E_1, E_2; R_1, R_2)\Delta E_1\Delta E_2$. В этом случае среднее по случайному полю значение любой функции F , зависящей от энергий и центров локализации двух уровней, представимо в виде

$$\langle F \rangle = \int dR_1 dR_2 \sum_{E_1, E_2} p_2(E_1, E_2, R_1, R_2) F \Delta E_1 \Delta E_2.$$

Как известно, в случае сближения двух потенциальных ям с примерно одинаковыми уровнями наступающее перекрытие волновых функций приводит к расщеплению и гибридизации уровней. Эти эффекты описываются при помощи введенной нами функции p_2 , задающей вероятность образования уровня E_1 в точке R_1 при условии существования уровня E_2 в точке R_2 . Выделяя одночастичные плотности состояний, представим p_2 в более удобной форме:

$$p_2(E_1, R_1, E_2, R_2) = \rho(E_1)\rho(E_2)K(R_1, E_1, R_2, E_2). \quad (1)$$

Здесь $\rho(E_1)$ и $\rho(E_2)$ — одночастичные плотности состояний, исследованные в [2]; функцию K назовем двухуровневой корреляционной функцией. Интерес к ней вполне обоснован: она нужна при расчете величин, зависящих от характеристик сразу двух уровней, когда информации, даваемой одной плотностью состояний, недостаточно [3]. Общая схема вычисления корреляционной функции соответствует аналогичным выкладкам, проведенным в трехмерном случае [4].

Используя метод оптимальной флуктуации, мы ищем K с логарифмической точностью:

$$K(R; E_1, E_2) = \langle \delta(\lambda_1[V] - E_1) \delta(\lambda_2[V] - E_2) \rangle,$$

где λ_1 и λ_2 — наименьшие собственные значения, отвечающие взаимно ортогональным состояниям ψ_1 и ψ_2 , которые возникают в потенциале $V(\mathbf{r})$ с двумя ямами, центрированными у точек R_1 и R_2 . В данном при-

ближении мы имеем $\ln K(R; E_1, E_2) \approx -S[V_0(\rho)]$, где оптимальная форма потенциала $V(\rho)$ должна быть определена из условий

$$S[V_0(\rho)] = \min_V S[V], \quad \lambda_1[V] = E_1, \quad \lambda_2[V] = E_2, \quad R = |R_1 - R_2|.$$

2. Вариационный метод. Отыскивая точку условного экстремума S в пространстве V , необходимо одновременно определить функции ψ_1 и ψ_2 . Каждая из них является точкой стационарности функционала [1, (2)] с соответствующим значением энергии в пространстве функций $\psi(\mathbf{q})$, которые в данном случае можно считать вещественными. Как и в [1, (3)], введем вспомогательный функционал в пространстве волновых функций $\psi(\mathbf{q})$ и функций $V(\mathbf{q})$. Естественно, он оказывается здесь более сложным:

$$Y[V, \psi_1, \psi_2] = S[V] + W^{-1}\{L[E_1, V, \psi_1] + L[E_2, V, \psi_2]\},$$

так как имеются дополнительные условия: потенциал $V(\mathbf{q})$ должен обладать двумя ямами на расстоянии R , а соответствующие волновые функции ψ_1 и ψ_2 должны быть ортогональными. Аналогичная одноуровневой задаче процедура приводит к уравнению, соответствующему [1, (5)]:

$$Z[\psi_1, \psi_2] = -\frac{1}{2W^2} \int d\rho d\rho' [\psi_1^2 + \psi_2^2] \Psi(|\rho - \rho'|) [\psi_1'^2 + \psi_2'^2] + \frac{1}{W} \int d\rho \left(\frac{1}{2} \nabla \psi_1^2 - E_1 \psi_1^2 + \frac{1}{2} \nabla \psi_2^2 - E_2 \psi_2^2 \right). \quad (2)$$

Первое слагаемое в правой части равно искомой величине с обратным знаком.

После определения точки стационарности по $\|\psi_1\|$ и $\|\psi_2\|$ мы получаем из (2)

$$\min Z[\psi_1, \psi_2] = Q[\psi_1, \psi_2],$$

$$Q[\psi_1, \psi_2] = (M_1^2 J_{11}^{-1} + M_2^2 J_{22}^{-1} - 2M_1 M_2 J_{12} J_{11}^{-1} J_{22}^{-1}) (1 - J_{12}^2 J_{11}^{-1} J_{22}^{-1})^{-1};$$

здесь

$$M_i[\psi_i] = \int d\rho \left[\frac{1}{2} \nabla \psi_i^2 - E_i \psi_i^2 \right] \quad i = 1, 2, \quad (3)$$

$$J_{ij}[\psi_1, \psi_2] = \frac{1}{2} \int d\rho d\rho' \psi_i^2(\rho) \Psi(|\rho - \rho'|) \psi_j^2(\rho'), \quad i, j = 1, 2. \quad (4)$$

Основное преимущество, достигнутое при переходе к функционалу Q , состоит в том, что последний прямо дает величину $K(R; E_1, E_2)$ в результате минимизации его по форме произвольно нормированных функций ψ_1 и ψ_2 . Функционал Q положительно определен и не сингулярен. Легко видеть, что он допускает правильный предельный переход в случае $R \rightarrow \infty$, т. е. при расстояниях R , заметно превышающих радиусы локализации волновых функций ψ_1 и ψ_2 . В этом случае можно пренебречь интегралом перекрытия J_{12} , условие ортогональности выполняется автоматически, и минимизация ведется уже по независимым ψ_1 и ψ_2 . При этом получаем $Q[\psi_1, \psi_2] = M_1^2 J_{11}^{-1} + M_2^2 J_{22}^{-1}$. Каждое из двух слагаемых совпадает с аналогичным функционалом [1, (2)]. Таким образом, как и следует, имеем при $R \rightarrow \infty$: $K(R; E_1, E_2) \rightarrow \rho(E_1) \rho(E_2)$. Прямой вариационный подход, помимо того, позволяет естественным образом учесть требования должной локализации и ортогональности волновых функций: минимизация проводится на классе пробных волновых функ-

ций, центрированных должным образом, скажем, в точках $R_1=0$ и $R_2=R$. Тогда оптимальная флуктуация потенциальной энергии $V_0(\rho)$ будет обладать двумя ямами. Мы используем, как и в первой статье, простейший возможный набор пробных водородоподобных функций, однако в настоящей статье в связи с наличием двух ям надо использовать линейные комбинации двух таких атомных функций, центрированных у $R_1=0$ и $R_2=R$. Другими словами, волновые функции будем искать в виде линейных комбинаций функций $e^{-\alpha_1\rho}$ и $e^{-\alpha_2|\rho-R|}$, причем вариационными параметрами будут служить коэффициенты этих линейных комбинаций и радиусы локализации атомных функций α_1^{-1} и α_2^{-1} . Естественно, выбор названных вариационных параметров должен быть подчинен условию ортогональности ψ_1 и ψ_2 . При расчете были использованы следующие выражения:

$$\psi_1(\rho) = \chi_1 \cos \gamma - \chi_2 \sin \gamma, \quad \psi_2(\rho) = \chi_1 \sin \gamma + \chi_2 \cos \gamma,$$

где

$$\chi_1(\rho) = \{2(1+s)\}^{-1/2} (\varphi_1 + \varphi_2), \quad \chi_2(\rho) = \{2(1+s)\}^{-1/2} (\varphi_1 - \varphi_2),$$

$$\varphi_1(\rho) = \alpha_1 \sqrt{2/\pi} e^{-\alpha_1\rho}, \quad \varphi_2(\rho) = \alpha_2 \sqrt{2/\pi} e^{-\alpha_2|\rho-R|}, \quad s = \int d\rho \varphi_1(\rho)\varphi_2(\rho). \quad (5)$$

Отметим роль вариационного параметра γ , характеризующего смешивание атомных функций. Минимизацию функционала Q по этому параметру гибридизации удается выполнить аналитически, и результат для определенного вида Ψ приведен ниже.

3. δ -Коррелированное случайное поле. Рассмотрим для конкретности случай, когда длина убывания парной корреляционной функции мала по сравнению с другими характерными длинами задачи (ср. [1, (6)]). При этом фигурирующие в функционале интегралы (3), (4) с функциями (5) просто, хотя и громоздко, вычисляются аналитически, и остается минимизировать явную функцию параметров α_1 , α_2 , γ и R . Соответствующая процедура осуществима уже лишь численно, и, в отличие от трехмерного случая, необходим счет на ЭВМ. Приведем результаты для случая близких энергий E_1 и E_2 . Именно: положим $\bar{E} = (E_1 + E_2)/2$, $\Delta = |E_1 - E_2|E^{-1}$ и будем считать, что $\Delta \ll 1$. Перечислим параметры, от которых зависит функционал Q . Параметром, содержащим явно энергию, является $\Delta = |E_1 - E_2|E^{-1}$. Кроме него в задаче участвуют три безразмерные длины: $R\sqrt{E}$, характеризующая расстояние между ямами; $\gamma_1 = \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} R$ — степень перекрытия волновых функций; $\gamma_2 = \frac{\alpha_2 - \alpha_1}{2} R$, описывающая расхождение в форме волновых функций.

Укажем последовательность минимизации функционала Q : задавался некоторый разброс уровней Δ и при изменении γ_1 в заданном интервале $[0,5; 6,0]$ определялись оптимизирующие функционал значения величин γ_2 и $R\sqrt{E}$. Таким образом, определялась величина p_2 , а при помощи (1) вычислялась K — функция корреляции уровней электрона в гауссовом случайном поле. Для представления результатов удобнее пользоваться обратной величиной $\Psi^{-1} \equiv K^{-1}$. При выбранном Δ результаты удобно представлять в трех различных областях: «дальней», «ближней» и «промежуточной» — они различаются по степени взаимного влияния взаимодействующих ям. (Разбиение — естественное следствие аналитического выражения для функционала Q после его минимизации по параметру гибридизации γ .)

Приведем данные для $\Delta=0,1$ (табл. 1). При указанном значении заметны все три области; с убыванием Δ промежуточная область уменьшается и в пределах точности расчета сжимается в точку. Зависимость от Δ в дальней области довольно слабая, а результаты, полученные для ближней области, существенно менее достоверны. Поэтому стоит

Таблица 1

γ_1	0,75	1,0	1,25	1,5	1,75	2,0	2,4	2,5	2,6	2,7	2,8	3,0	3,5	4,0	5,5
$R\sqrt{E}$	0,4	0,45	0,5	0,6	0,65	0,7	0,8	0,85	0,85	0,9	0,95	1,0	1,2	1,5	2,5
Ψ^{-1}	1,68	1,58	1,52	1,47	1,43	1,40	1,36	1,34	1,32	1,31	1,30	1,29	1,26	1,20	1,05

привести результаты для промежуточной области при нескольких значениях Δ (табл. 2).

При $\Delta=0,01$ промежуточная область практически исчезает. Более удобным и наглядным способом представления результатов данного расчета являются графики.

Таблица 2

	$\Delta=0,07$				$\Delta=0,05$			$\Delta=0,01$		
γ_1	2,8	2,9	2,95	3,0	2,95	3,0	3,05	3,075	3,1	3,125
$R\sqrt{E}$	1,0	1,05	1,1	1,15	1,1	1,15	1,20	1,2	1,25	1,25
Ψ^{-1}	1,36	1,35	1,345	1,34	1,365	1,36	1,355	1,37	1,365	1,36

На рис. 1 представлена зависимость Ψ^{-1} от γ_1 для семейства кривых, характеризуемых различными значениями параметра Δ , сплошная кривая отвечает $\Delta=0,1$, пунктирные — $\Delta=0,07$; $0,05$ и $0,01$ соответ-

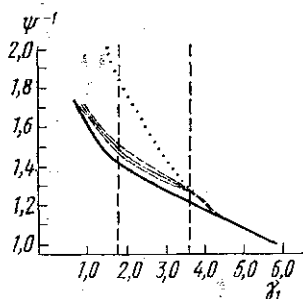


Рис. 1

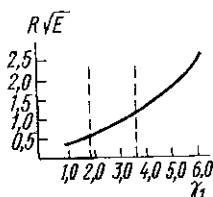


Рис. 2

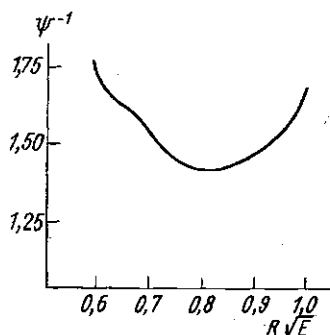


Рис. 3

венно снизу вверх, точечная — результат минимизации Q при $\gamma_2=0,07$, превышающем оптимальное значение γ_2 .

Метод оптимальной флуктуации позволяет определить не только значение функционала в точке минимума, но и связь между оптимизирующими функционал параметрами. На рис. 2 представлена одна из

зависимостей, получаемых подобным способом, — зависимость степени перекрытия волновых функций различных ям от расстояния между ними.

Представляет интерес форма гиперповерхности, на которой ищется минимум функционала Q . На рис. 3 глубина соответствующего минимума характеризуется зависимостью Ψ^{-1} от $R\sqrt{E}$ при фиксированном значении γ_2 .

Отметим, что довольно громоздкий функционал допускает тем не менее проведение ориентированного расчета. Проведенные выкладки позволили уточнить представляющую интерес область изменения варьируемых параметров, что заметно снизило необходимые затраты машинного времени.

4. Выводы. Наиболее важными для приложений, по-видимому, являются результаты, полученные для дальней области. Она начинается с расстояний порядка 3—4 радиусов локализации. Каждая из функций ψ_1 и ψ_2 практически совпадает с атомной, включая лишь экспоненциально малую добавку от «чужой» ямы. Зависимость от разностей энергий Δ практически отсутствует, хотя на границе области существует участок с заметным еще эффектом квантового отталкивания уровней. При уменьшении расстояния между ямами функции ψ_1 и ψ_2 становятся равными соответственно симметричной и антисимметричной линейным комбинациям атомных функций. Размеры «промежуточной» области определяются величиной разброса уровней, ближняя граница ее находится на расстоянии порядка двух радиусов локализации. Представляется интересной попытка учета этих эффектов при рассмотрении состояний электронов, принадлежащих комплексу сравнительно близких потенциальных ям. Результаты, относящиеся к ближней области, следует рассматривать как явную демонстрацию эффекта сильного отталкивания уровней. Конкретные численные данные, однако, должны восприниматься как ориентировочные ввиду ограниченности класса пробных функций.

Таким образом, с помощью метода оптимальной флуктуации в настоящей работе явно продемонстрирован характер убывания вероятности появления двух близких по энергии состояний в хвосте плотности состояний при сближении их центров локализации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Миронов А. Г., Новак М. Г. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1984, 25, № 2, с. 25. [2] Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 1967, 53, № 2, с. 743. [3] Бояч-Бруевич В. Л. ЖЭТФ, 1970, 59, № 2, с. 985. [4] Миронов А. Г. ТМФ, 1982, 50, № 2, с. 308.

Поступила в редакцию
28.06.83

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 25, № 2

УДК 621.374.4

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫХ НЕЛИНЕЙНО-ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ДЕЛИТЕЛЕЙ ЧАСТОТЫ ВЫСОКОЙ КРАТНОСТИ НА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

В. С. Макаров, В. И. Медведев

(кафедра физики колебаний)

§ 1. Введение. В настоящее время делители частоты находят широкое применение в различных областях науки и техники. На протяже-