УДК 538.915

В.М.Бурдейний
В.Х.Касіяненко

ОПЕРАТОР ЕВОЛЮЦІЇ ЕЛЕКТРОНІВ У ОДНІЙ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ З КОНТУРОМ БЛИЗЬКИМ ДО КОЛОВОГО

Вінницький національний технічний університет

Анотація

Для квантової точки, обмеженої контуром випадкової форми близької до кола, досліджено вплив нерегулярностей контуру на оператор еволюції в балістичному режимі. Застосовано конформне відображення випадково границі на канонічну. В основному наближенні по спектральній густині флуктуацій геометричної форми із застосуванням перетворення Лапласа встановлено оператор еволюції у замкненому вигляді.

Ключові слова: оператор Ліуввіля, балістичне розсіяння,конформне відображення, усереднення по реалізаціях, перетворення Лапласа.

Abstract

The impact of boundary contour irregularities on evolution operator of nearly circular quantum dot in ballistic regime has been investigated. The conform mapping method of reduction irregular contour to the canonical one was applied. The evolution operator in the main approximation in relation to spectral density of geometrical form has been found. The final form of evolution operator is determined in term of the Laplace transform.

Key words: *Liouville operator, ballistic scattering, conform mapping, averaging over realizations, Laplace transform.*

Загально відомо, що розсіяння носіїв чи інших елементарних збуджень, є визначальним для більшості ефектів, які протікають у конденсованих системах. Обмін енергією та імпульсом, завдяки якому відбувається перехід до рівноважного або стаціонарного стану, здійснюється через зіткнення носіїв із структурними дефектами різноманітної природи або елементарними збудженнями, такими як фонони, магнони, чи іншими носіями. Зі зменшенням розмірів зростаючою стає роль розсіяння на границях зразка. Цей механізм розсіяння стає домінантним для гранульованих металів[1], металевих кластерів, напівпровідникових квантових точок, коли характерний розмір зерен, кластерів чи квантових точок стає меншим, ніж середня довжина вільного пробігу обумовлена вище згаданими механізмами, тобто має місце перехід від релаксації по дифузійному сценарію до балістичного режиму[2].

Дослідження балістичного розсіяння електронів у квантових точках має не тільки прикладний аспект для тлумачення і прогнозування електронного транспорту, гальвано-магнітних явищ, оптичних та резонансних ефектів у мезо- і наноматеріалах, але є суттєво важливим з огляду на поєднання в таких системах універсальних закономірностей, які асоціюються із топологією, просторовою розмірністю, наявністю чи відсутністю особливих симетрій оператора Гамільтона, та таких, які чутливі до розмірів, форми і інших індивідуальних особливостей зразків. Не менш важливим є те, що розсіяння електронів на границях зразка у балістичному режимі перебуває в тій області фізики конденсованого стану, де сходяться квантова механіка невпорядкованих систем і динаміка класичного хаосу. А тому цілком закономірним є незгасаючий інтерес до проблематики, що підкреслюється в науковій періодиці[3].

Основною моделлю квантової точки з балістичним розсіянням є квантовий чи класичний більярд, в якому балістичність проявляється тим, що у внутрішній області відбувається вільний рух частинки, тоді як зіткнення мають місце лише зі стінками більярду. Проте, навіть у такій найпростішій моделі виникає проблема врахування невпорядкованості в такий, щоб без втрати загальності, забезпечити адекватний опис еволюції системи. Відповідний підхід реалізовано в роботах [2,4], де автори, виходячи зі стандартної сигма-моделі для балістичних невпорядкованих систем із використанням методу суперсиметрії, показують, що в балістичному режимі змінюється описання просторової еволюції системи. Якщо дифузійний процес описується оператором Лапласа, то у випадку балістичного розсіяння на границях лапласіан змінюється на лінійний по частинних похідних оператор Ліувілля, який в декартових координатах має вигляд:

$$\hat{K} = v_F \vec{n} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \qquad (1)$$

де v_F – швидкість на поверхні Фермі, $\vec{n}$ – одиничний вектор напрямлений вздовж імпульсу електрона. Тут і надалі постійна Дірака прийнята рівною одиниці, тобто $\hbar = 1$.

Оскільки у роботах[2-4] досліджуються принципові питання обгрунтування і розвитку теорії та найбільш суттєві проблеми, які стосуються статистики енергетичних рівнів, статистики хвильових функції, то там розглядається найпростіша геометрична модель квантової точки, яка має вигляд круга з радіусом R. Проте реальні квантові точки в силу технологічних факторів мають форму, яка відрізняється від цієї канонічної, і так як у балістичному режимі релаксація імпульсу і енергії здійснюється через зіткнення з границею системи, то виникає цілком очевидна необхідність врахувати роль відхилень форми граничного контуру точки від вище згаданої колової.

Розсіяння носіїв дає свій вклад до оператора Гамільтона системи. Саме встановленню деяких особливостей цього вкладу приурочена дана робота, модельні припущення якої зводяться до наступного:
1) Динаміка руху носіїв описується оператором Ліувілля (1); 2).Конфайнмент електронів забезпечується, як це має місце в експериментальних умовах, випадковим за формою контуром; 3).Відхилення від канонічності малі у порівнянні із середнім радіусом квантової точки; 4) При всіх реалізаціях випадкового контуру площа точки залишається незмінною, завдяки чому у основному порядку зберігається визначена формулою Вейля густина станів.

Динаміка електрона у квантовій точці в умовах балістичної моделі була і залишається бути об'єктом дослідження багатьма групами авторів (обширна біліографія приведна в [3]). В подальшому викладі нами використовуються результати однієї з цих робіт, а саме [4], у відповідності з якою основною характеристикою є функція Гріна (пропагатор) $G(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) \equiv \hat{G}(t)$, яка визначає ймовірність переходу електрона із точки з радіус-вектором $\vec{r}_2$ в точку з радіус-вектором $\vec{r}_1$ протягом часу t і є ядром оператора Ліувілля. Функція Гріна є розв'язком рівняння еволюції

$$\frac{\partial \tilde{G}(t)}{\partial t} + \hat{K}_0 \tilde{G}(t) = 0 \qquad (2)$$

з початковою умовою

$$\left. \tilde{G}(t) \right|_{t=0} = \frac{1}{\pi \nu} \left[\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \frac{1}{V} \right] \qquad (3).$$

Тут ν – відстань між енергетичними рівнями, а V – площа квантової точки, яка для всіх випадкових реалізацій випадкового контуру має одне і те ж значення, що і забезпечує в основному порядку по степенях $R / V^{1/2}$ забезпечує виконання приведеного вище обмеження 4). Слід зауважити, що рівняння (2) і (3) записані для двомірної квантової точки, яка асоціюється з близькою до круга областю комплексної площини Z.

Задача (2)-(3) при дифузному розсіянні на границях області розв'язна у вище згаданій роботі [4]. А тому функція Гріна, а також власні функції оператора Ліуввіля для кругової області вважаються відомими. При відхиленні форми контуру від ідеальної виникає додатковий механізм розсіяння, врахування якого пропонується здійснити шляхом конформного відображення замкненої області, яка і є квантовою точкою, комплексної площини Z у канонічну, а саме кругову, комплексної площини W. Таке перетворення при виконанні обмежень 2) і 3) дозволяє розвинути теорію збурень.

Отже, виконується конформне перетворення

$$w = w(z) \qquad (4)$$

яким область площини Z відображається в канонічну, а саме коло з радіусом R, область комплексної площини W. Відповідний метричний тензор $\hat{g}$ визначається формулою:

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} \partial_u x & \partial_u y \\ \partial_v x & \partial_v y \end{pmatrix} \qquad (5)$$

за допомогою якої компоненти градієнта в площині W записуються так:

$$\begin{pmatrix} \partial_u \\ \partial_v \end{pmatrix} = \hat{g} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_u x & \partial_u y \\ \partial_v x & \partial_v y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x \\ \partial_y \end{pmatrix} \qquad (6)$$

Співвідношення (6) дозволяє знайти градієнт у системі координат площини Z після чого оператор Ліуввіля (1) може бути приведений до наступного вигляду:

$$\hat{K} = v_F \frac{1}{\|\hat{g}\|} [n_x(\partial_v y \partial_u - \partial_u y \partial_v) + n_y(-\partial_v x \partial_u + \partial_u x \partial_v)] \qquad (7)$$

Оскільки канонічна область у площині W має форму круга, то доцільно перейти до полярних координат. Виразивши частинні похідні у полярних координатах ρ і ϑ і врахувавши умови Коші-Рімана стосовно оператора $\hat{K}$ приходимо до остаточного результату:

$$\hat{K} = \frac{1}{g}\left[\hat{K}_0 + \hat{W}(\vec{n}, \rho, \vartheta)\right] \qquad (8)$$

де $\hat{K}_0 = v_F \vec{n} \vec{\nabla}_{\vec{w}}$ $-$оператор Ліуввіля, який відповідає ідеальному круговому контуру, g – визначник метричного тензора, а

$$\begin{aligned} \hat{W}(\vec{n}, \rho, \vartheta) = \Big[& v_F (\cos\vartheta \cdot \partial_\rho R - \sin\vartheta \cdot \partial_\vartheta R / \rho)(n_x \partial_u + n_y \partial_v) + \\ & + v_F (\sin\vartheta \cdot \partial_\rho R + \cos\vartheta \cdot \partial_\vartheta R / \rho)(n_x \partial_v - n_y \partial_u) \Big] \end{aligned} \qquad (9)$$

$-$збурення, викликане відхиленням геометричної форми контуру від ідеальної, причому тут фактор форми враховується похідними $\partial_\rho R$ і $\partial_\vartheta R$, а також прийнято до уваги особливості конформного відображення близьких областей[5].

Конформне перетворення модифікує рівняння еволюції (2) і початкову умову (3). Оскільки площа квантової точка залишається сталою, то з врахуванням властивостей дельта-функції Дірака, рух частинки описується рівняннями:

$$g \frac{\partial \tilde{G}(t)}{\partial t} + (\hat{K}_0 + \hat{W}) \tilde{G}(t) = 0 \qquad (10)$$

$$\tilde{G}(t)\Big|_{t=0} \equiv G_0 = \frac{1}{\pi v}\left[\delta(\vec{w} - \vec{w}') - \frac{1}{V}\right] \qquad (11)$$

Стандартне для рівнянь такої структури перетворення Лапласа приводить для образу функції Гріна $\hat{G}(p)$ до рівняння:

$$(p + \hat{K}_0 + \hat{V}) \hat{G}(p) = G_0 \qquad (12)$$

Тут $\hat{V} = p(g - I) + \hat{W}$ може розглядатися як збурення по відношенню до балістичного розсіяння в ідеальній круговій квантовій точці. Оператор збурення стосується певної реалізації випадкового контуру. А це означає, що після того. як було б розв'язане рівняння (12), до цього розв'язку слід застосувати усереднення по реалізаціях.

Апробований на величезній кількості проблем теорії багатьох тіл усереднення зводиться до того, що за аналогією з функцією Гріна, яка описує систему взаємодіючих частинок, вводиться оператор власної енергетичної частини $\Sigma(p)$, який визначається співвідношенням:

$$[p + \hat{K}_0 + \Sigma(p)]^{-1} = \left\langle (p + \hat{K}_0 + \hat{V})^{-1} \right\rangle \qquad (13)$$

в якому символ $\langle \ldots \rangle$ означає усереднення. Важливо, що випадкове поле залежить лише від частинних перших похідних. Прийнявши, що випадкові функції , якими визначається форма контуру, розподілені по нормальному закону і застосувавши теорему Віка, для розподілу випадкових частинних похідних $\xi = \partial_{\vartheta} R$ і $\eta = \rho \partial_{\rho} R$ можна одержати:

$$f\left(\xi,\eta\right) = \frac{1}{2\pi S^2} \exp\left\{ -\frac{1}{2S^2}(\xi^2 + \eta^2) \right\} \tag{14}$$

Отже частинні похідні розподілені по нормальному закону з дисперсією S^2, яка залежить від спектральної функції бінарних кореляцій.

Розкладом у операторний ряд праву частину можна подати так:

$$\left\langle (p + \hat{K}_0 + \hat{V})^{-1} \right\rangle = (p + \hat{K}_0)^{-1} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left\langle [(p + \hat{K}_0)^{-1} \hat{V}]^n \right\rangle (p + \hat{K}_0)^{-1} \tag{15}$$

Врахування означення (13) дає щодо власної енергетичної частини рівняння :

$$\hat{\Sigma}(p) = \left\langle \hat{V}\hat{G} \right\rangle [p + \hat{K}_0 + \hat{\Sigma}(p)] \tag{16}$$

формально точний розв'язок якого має вигляд:

$$\hat{\Sigma}(p) = \left[I - \left\langle \hat{V}\hat{G} \right\rangle \right]^{-1} \left\langle \hat{V}\hat{G} \right\rangle (p + \hat{K}_0) \tag{17}$$

Одержане співвідношення по суті є згорнутим рядом теорії збурень. Підстановкою функції Гріна $\hat{G}$ і розклад її по степенях незбуреного пропагатора $(p + \hat{K}_0)^{-1}$ з подальшим усередненням по конфігураціях випадкового контуру, можна отримати власну енергетичну частину у будь-якому порядку теорії збурень. Проте цей простий за суттю алгоритм в силу необхідності інтегрування по внутрішніх індексах не дозволяє отримати компактний результат. Тому, прийнявши до уваги раніше викладені обмеження, які стосуються моделі, що тут розглядається, запишемо результат у другому порядку теорії збурень. З таким підходом одержуємо:

$$\hat{\Sigma}(p) = \left\langle \hat{V} \right\rangle - \left\langle \hat{V}(p + \hat{K}_0)^{-1} \hat{V} \right\rangle + \left\langle \hat{V} \right\rangle (p + \hat{K}_0)^{-1} \left\langle \hat{V} \right\rangle \tag{18}$$

Співвідношення (18) розв'язує проблему оператора власної енергії. Після цього оберненим перетворенням Лапласа одержується рівняння,

$$\left\langle \hat{G}(t) \right\rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma - i\infty}^{\sigma + i\infty} e^{pt} [p\hat{I} + \hat{K}_0 + \hat{\Sigma}(p)]^{-1} G_0 dp \tag{19}$$

яким остаточно описується еволюція частинок у балістичному більярді з випадковими порушеннями граничного контуру.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1.Beloborodov, I.S.,A.V.Lopatin, V.M.Vinokur, K.B.Efetov, Granular Electronic Systems, Reviews of Modern Physics, 2007,79(2),469

2.Mirlin,A.D.,Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems, Phys/Rep., 2000,326, 259

3.Evers,F.,Mirlin A.D., Anderson Transitions, Reviews of.Modern Physics, 2008, 80, 1355

4.Blanter,Ya.M.,A.D.Mirlin, and B.A.Muzykantskii, Level and Eigenfunction Statistics in Billiards with Surface Scattering, arXiv.0707.4378v1[cond-mat.mess-hall],30Jul,2007

5.Лаврентьев М.А.,Б.В.Шабат, Методы теории функций комплексного переменного, М.,Наука,1987, 688с.

.

Бурдейний Володимир Мефодійович,*кандидат фізико-математичних наук,доцент, професор кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.* brdnvldmr@ukr.net

Касіяненко Василь Харитонович, *доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри загальної фізики, Вінницький національний технічний університет, м.Вінниця.*

Burdeinyy Volodymyr Mefodiyovych, *PhD in Physics and Mathematics, associated professor of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia , brdnvldmr@ukr.net*

Kassianenko Vasul Kharutonovuch*, Doctor of Sciecies in Physics and Mathematics, professor, Chief of General Physics Department, Vinnytsia National Technical University, Vinnytsia .*