УДК 538.915

РЕЛАКСАЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ НА НЕОДНОРІДНОСТЯХ ГРАНИЧНОГО КОНТУРУ КВАНТОВОЇ ТОЧКИ

Бурдейний В.М.,Вінницький національний технічний університет, Україна, м.Вінниця, Хмельницьке шосе 95, brdnvldmr@ukr.net
Касіяненко В.Х., Вінницький національний технічний університет, Україна, м.Вінниця, Хмельницьке шосе 95, cassic@gmail.com

Анотація
Досліджено релаксацію електронів внаслідок їх розсіяння геометричними неоднорідностями граничного контуру квантової точки близької до кругової. Наближеним конформним перетворенням область відображена на канонічну кругової форми. Рівняння еволюції в часі розв'язане перетворенням Лапласа. В основному наближенні по спектральній густині флуктуацій геометричної форми встановлено полюси лапласівского образу ядра.
Ключові слова: флуктуації форми контуру, рівняння еволюції, конформне відображення. перетворення Лапласа, полюси ядра рівняння Ліуввіля.

Система носіїв заряду приходить до стану рівноваги шляхом обміну енергією і імпульсом з іншими носіями, фононами, домішковими атомами, тощо. Серед не згаданих тут механізмів релаксації, не останню роль відіграє розсіяння на поверхнях, які просторово обмежують систему. Особливо важливим є цей механізм розсіяння для гранульованих металів[1], металевих кластерів, напівпровідникових квантових точок, коли характерний розмір зерен, кластерів чи квантових точок стає меншим, ніж середня довжина вільного пробігу, тобто має місце перехід від релаксації по дифузійному сценарію до балістичного режиму[2].

З прикладної точки зору дослідження релаксації електронів на границях зразка цікаве насамперед тим, що воно є досить інформативним у тлумаченні електронного транспорту, гальвано-магнітних явищ, оптичних ефектів у мезо- і наноматеріалах. З академічного погляду в процесах релаксації на границя має місце поєднання універсальних закономірностей, які асоціюються із топологією, розмірністю системи, наявністю чи відсутністю особливих симетрій оператора Гамільтона, та таких, які чутливі до розмірів, форми і інших індивідуальних особливостей зразків. З іншого боку розсіяння електронів у балістичному режимі перебуває в епіцентрі, 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].

Авторами багатьох робіт[4] показано, що статистика енергетичних рівнів, кореляція хвильових функцій успішно і результативно вивчається в рамках $\sigma-$моделі із застосуванням методів квантової теорії поля. В контексті балістичного режиму рух електрона описується оператором Ліуввіля, який в декартових координатах має вигляд:

$$\hat{K} = v_F \vec{n} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \tag{1}$$

де $v_F -$швидкість на поверхні Фермі, а $\vec{n} -$одиничний вектор напрямлений вздовж імпульсу електрона. Розсіяння на границі зразка, який в оригінальній роботі[4] моделюється кругом радіуса R, враховується краєвими умовами. Граничні умови мають забезпечити рівність нулю густини ймовірності в граничних точках і зводяться до загального співвідношення:

$$\psi(\vec{r},\vec{n}) = \left(\int\limits_{(\vec{N}\vec{n}'>0} B(\vec{n},\vec{n}')(n'\vec{N})d\vec{n}' \right)^{-1} \int\limits_{(\vec{N}\vec{n}')>0} B(\vec{n},\vec{n}')\psi(\vec{r},\vec{n}')(n'\vec{N})d\vec{n}' \ , \ (\vec{N}n)<0$$

Тут $B(\vec{n},\vec{n}')$ – деяке ядро, $\vec{N}$ – зовнішня нормаль до граничного контуру, а точка $\vec{r}$ взята на границі області, причому у випадку, який був об'єктом дослідження в роботах [2] $|\vec{r}| = R$.

Ядро $B(\vec{n},\vec{n}')$ інтенсивно досліджувалося в контексті краєвих умов для функції розподілу[5] при розсіянні шершавою поверхнею і є чутливим до припущень модельного характеру. В даній роботі розглядається механізм релаксації, який для ідеальної кругової геометрії запропоновано авторами [4]. Згідно із цією моделлю рух електрона у внутрішній області зразка відбувається без розсіяння , яке має місце лише у околі границі у тонкому шарі з товщиною набагато меншою, ніж довжина хвилі де Бройля. Крім цього, розсіяння має чисто дифузний характер, а тому $B(\vec{n},\vec{n}') = 1$ а гранична умова зводиться до наступної форми:

$$\psi(\vec{r},\vec{n}) = \pi \int_{(\vec{N}\vec{n}')>0} \psi(\vec{r},\vec{n}')(n'\vec{N})d\vec{n}' \quad , \quad (\vec{N}n) < 0 \tag{3}$$

В моделі, яка розглядається в даній роботі, крім короткодіючих центрів розсіяння, розподілених на контурі, розглядається релаксація за рахунок геометричних дефектів границі, завдяки яким граничний контур відрізняється від ідеального кола.

Ефект форми можна врахувати граничиними умовами. Проте. навіть для випадку чисто дифузного розсіяння,умова, виражена формулою (3) стає складною для застосування в зв'язку з необхідністю інтегрування по контуру з невідомою, взагалі кажучи. хаотичною формою. Тому тут пропонується використати метод конформних перетворень, які дозволяють трансформувати контур в один із канонічних, зокрема в коло. Завдяки цьому граничні умови спрощуються, а ефект геометричної форми переноситься на Гамільтоніан системи, який зводитьс до оператора Ліуввіля (1).

Отже, виконаємо конформне перетворення

$$w = w(z) \tag{4}$$

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

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

за допомогою якої компоненти градієнта в площині W записуються так:

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

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

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

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:

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

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

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

$-$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[6].

Подальші розрахунки вимагатимуть процедури усереднення по реалізаціях випадкових контурів, для чого у відповідності з (8) і (9) необхідно конкретизувати функції розподілу частинних похідних. Цей розподіл у іншому контексті було встановлено в роботі [7] для дослідження вібраційного спектру мембрани з хаотичними закріпленими границями. Вважаючи, що випадкові функції якими визначається форма контуру, розподілені по нормальному закону і застосовуючи для конфігураційного усереднення теорему Віка, для розподілу випадкових функцій $\xi=\partial_\vartheta R$ і $\eta=\rho\partial_\rho R$ знаходимо:

$$f(\xi,\eta)=\frac{1}{2\pi S^2}\exp\left\{-\frac{1}{2S^2}(\xi^2+\eta^2)\right\} \qquad (10)$$

Отже частинні похідні розподілені по нормальному закону з дисперсією S^2, яка визначається співвідношенням

$$S^2=\sum_{m\geq 1}\sigma_{m-1}\cdot m^2\rho^{2m} \qquad (11)$$

де

$$\sigma_m=s_0, m=0; \quad \sigma_m=2s_m, m\geq 1; \qquad (12)$$

а s_m є спектральною густиною парного корелятора $\Delta(\tau)$ флуктуацій граничного контуру визначена формулою:

$$s_m=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\Delta(\tau)\exp(-im\tau)\,d\tau \quad . \qquad (13)$$

Ядро оператора Ліуввіля $G(\vec{r}_1,\vec{n}_1;t,\vec{r}_2)\equiv\tilde{G}(t)$, в якому $\vec{r}_1$ і $\vec{r}_2$ $-$координати електрона, задані у площині Z, описується рівнянням еволюції:

$$\frac{\partial\tilde{G}(t)}{\partial t}+\hat{K}_0\tilde{G}(t)=0 \qquad (14)$$

з початковою умовою

$$\tilde{G}(t)\Big|_{t=0}=\frac{1}{\pi\nu}\left[\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)-\frac{1}{V}\right] \qquad (15).$$

Тут $\nu-$відстань між енергетичними рівнями, а $V-$площа квантової точки, яка для всіх випадкових реалізацій випадкового контуру має одне і те ж значення, що у відповідності із формулою Вейля в основному порядку по степенях $R/V^{1/2}$ забезпечує збереження кількості енергетичних рівнів.

Застосувавши до рівняння еволюції перетворення Лапласа по часу і конформне відображення (4), одержимо

$$(p+\hat{K}_0+p\Lambda\hat{K}_0+\hat{W})G(p)=G_0(p) \qquad (16)$$

У цьому рівнянні $\Lambda=g-1$, а $G_0(p)-$лапласівське зображення ядра, яке описує хаотичну динаміку електрона в квантовій точці з границею у вигляді правильного кола і встановлене у роботах[3,4]. Формальний розв'язок рівняння (16) має наступну операторну форму:

$$G(p)=(p+\hat{K}_0+p\Lambda\hat{K}_0+\hat{W})^{-1}G_0(p) \qquad (17)$$

Усереднення по конфігураціях граничного контуру з функцією розподілу похідних, вираженою формулою (10) дає

$$\left\langle G(p) \right\rangle = \left\langle (p + \hat{K}_0 + p\Lambda\hat{K}_0 + \hat{W})^{-1} \right\rangle G_0(p) \tag{18}$$

Часи релаксації визначаються полюсами усередненої функції Гріна (18), тобто нулями оператора $\left\langle (p + \hat{K}_0 + p\Lambda\hat{K}_0 + \hat{W})^{-1} \right\rangle^{-1}$. Власні значення λ_n і відповідні власні функції оператора Ліуввіля, які на межі кругової точки задовольняють дифузниним краєвим умовам (3) знайдені у роботах[3,4]. З використанням згаданих результатів і розглядаючи діагональну частину оберненої усередненої функції Гріна, одержуємо рівняння

$$p + \lambda_n + \sum_m \frac{\left[p^2 \lambda_m \lambda_n \left\langle \Lambda^2 \right\rangle_{nm} + \left\langle W^2 \right\rangle_{nm} \right]}{p + \lambda_m} = 0 \tag{19}$$

Виділивши звідси діагональні елементи, приходимо до квадратного рівняння, з якого випливає остаточна наближена формула, яка визначає координату полюсу ядра рівняння еволюції в основному порядку по спектральній густині флуктуацій форми контуру:

$$p = -\frac{\lambda_n \pm i\sqrt{\left\langle W^2 \right\rangle_{nn} + \lambda_n^4 \left\langle \Lambda^2 \right\rangle_{nn}}}{1 + \lambda_n^2 \left\langle \Lambda^2 \right\rangle_{nn}} \tag{20}$$

Співвідношення (20) є основним результатом роботи і показує, що розсіяння електронів на неоднорідностях граничного контуру проявляється не тільки тим, що має місце зміна часу релаксації, а і появою додаткового в порівнянні з ідеальним коловим контуром осциляційного вкладу до ядра рівняння еволюції.

Література

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.Басс Ф.Г.,И.М.Фукс, Рассеяние волн на статистически неровной поверхности,1972
6.Лаврентьев М.А.,Б.В.Шабат, Методы теории функций комплексного переменного, М., Наука,1987, 688с.
7.Бурдейна О.В.,П.В.Гель, В.М.Бурдейний, Модифікація вібраційного спектру мембрани з нерегулярним хаотичним контуром, Вібрації в техніці та технологіях,№1(61),2011,9-14

ELECTRON RELAXATION BY IRREGULARITIES OF BOUNDARY CONTOUR OF QUANEUM DOT

Burdeynyy V.M.,Kasiyanenko V.Kh.

Abstract
Relaxation of electrons because of scattering by boundary roughness in ballistic quantum dot has been studied. Considering normal distributions of the geometric form fluctuations and applying conform mapping equation of time evolution was found/ After Laplace transformation using and averaging over boundary contour random distribution the poles of the Liouville equation kern were determined.

Key words: contour for fluctuations, equation of time evolution, conform mapping,Laplace transformation,kern's poles of Liouville equation.