

Электронный спектр неупорядоченной бинарной линейной цепочки

М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник

Институт металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, пр. Вернадского, 36, г. Киев, 03142, Украина

E-mail: ivanov@imp.kiev.ua

Статья поступила в редакцию 24 декабря 2010 г.

В рамках модели сильной связи проведены численные расчеты одноэлектронных спектров длинных неупорядоченных двухкомпонентных линейных цепочек и определена общая структура спектра. Показано, что в области локализованного уровня спектр имеет четкую иерархию и свойства самоподобия, характерные для фракталов. Определено распределение интервалов между уровнями внутри квазинепрерывного спектра и показано, что это распределение носит случайный экспоненциальный характер без провала в области малых интервалов. Найдено изменение общего вида плотности состояний в квазинепрерывной области спектра. Показано, что появляются серии особенностей, состоящих из резонансных минимумов и максимумов, которые сгущаются к краям зоны. С ростом разности энергетических уровней компонент такие особенности постепенно превращаются в запрещенные зоны с ширинами, линейно зависящими от концентрации. Установлено, что положения этих особенностей не зависят от параметров компонент и их концентрации, а определяются собственными энергиями коротких цепочек атомов основного компонента. Найдена также общая структура спектра при соизмеримой концентрации разных атомов.

У рамках моделі сильного зв'язку проведено чисельні розрахунки одноелектронних спектрів довгих неупорядкованих двокомпонентних лінійних ланцюжків та визначено загальну структуру спектра. Показано, що в області локалізованого рівня спектр має чітку ієрархію та властивості самоподоби, які характерні для фракталів. Визначено розподіл інтервалів між рівнями усередині квазінеперервного спектра та показано, що цей розподіл носить випадковий експонентний характер без провалу в області малих інтервалів. Знайдено зміну загального виду щільності станів у квазінеперервній області спектра. Показано, що з'являються серії особливостей, що складаються із резонансних мінімумів і максимумів, які згущаються до країв зони. З ростом різниці енергетичних рівнів компонент такі особливості поступово перетворюються в заборонені зони із ширинами, які лінійно залежать від концентрації. Установлено, що положення цих особливостей не залежать від параметрів компонентів і їх концентрації, а визначаються власними енергіями коротких ланцюжків атомів основного компонента. Знайдено також загальну структуру спектра при порівнянній концентрації різних атомів.

PACS: 73.22.-f Электронная структура наноразмерных материалов и аналогичных систем;

71.23.-k Электронная структура неупорядоченных твердых тел;

71.55.-i Примеси и энергетические уровни дефектов.

Ключевые слова: модель сильной связи, одноэлектронный спектр, плотность состояний, запрещенная зона.

1. Введение

В наших предыдущих работах [1–5] исследована структура колебательного спектра неупорядоченных изотопических цепочек, состоящих из атомов двух сортов. При этом основное отличие от более ранних работ Дина [6] состояло в том, что количество элементов цепочки выбиралось макроскопически большим

(вплоть до $N = 10^{10}$), что позволило получить целый ряд принципиально новых результатов. В частности, было показано, что в окрестности локального уровня, при не слишком высокой концентрации одной из компонент, структура спектра не только имеет сложный иерархический характер, что согласуется с работами других авторов, начиная с работ И.М. Лифшица [7,8], но и обладает свойствами самоподобия, характерными

для фрактала. Другой важной особенностью спектра таких неупорядоченных систем оказался тот факт, что внутри квазинепрерывной области спектра вблизи набора фиксированных частот, положения которых не зависят от концентрации и массы атомов второго типа, возникают характерные особенности. При этом по мере роста величины возмущения и концентрации указанных атомов в этих областях сначала возникают провалы, а затем формируются запрещенные зоны. Положения указанных особенностей в значительной степени коррелируют с положением частот с нулевой плотностью состояний, впервые отмеченных в работах [9,10]. Проанализированы и другие особенности колебательного спектра неупорядоченных цепочек, включая характер распределения частот в области непрерывного спектра.

В настоящей работе сделана попытка рассмотреть аналогичные вопросы для одноэлектронных спектров неупорядоченных цепочек в рамках однозонной модели сильной связи. При этом будем полагать, что атомы разного сорта различаются значениями атомных уровней, а интегралы перескока не зависят от сорта атома. Не в последнюю очередь, благодаря своей простоте, выбранная модель широко используется в физике неупорядоченных систем. Хорошо известно, что она способна служить надежным базисом для теоретического описания основных эффектов, вызванных наличием беспорядка замещения в системе, по крайней мере, на качественном уровне. Обычно неизменность интегралов перекрытия в данной модели объясняется присутствием исключительно изовалентных примесей замещения. Однако изменение потенциала на узле может быть обусловлено не только соответствующими атомами замещения, но и наличием добавочного примесного атома, который образует химическую связь с одним из атомов цепочки. В этом случае межатомные интегралы перескока для электронов должны оставаться практически прежними. При этом само возмущение может считаться одноузельным и соответствующим простому сдвигу потенциала, если привносимые в систему вместе с добавочным атомом характерные энергетические уровни находятся вдали от рассматриваемой электронной зоны. Применительно к низкоразмерным системам, локальный сдвиг атомного уровня может также происходить из-за кулоновского взаимодействия с заряженной примесью, находящейся в подложке, на которой находится данный низкоразмерный объект. Можно рассматривать и другие многочисленные механизмы смещения узельных потенциалов, связанные с изменением структуры, состава подложки или трехмерной матрицы, которые содержат выделенную цепочку. Такого типа модель может быть использована также для описания транспорта электронов в длинных биологических молекулах, в которых присутствуют радикалы разного сорта.

Учитывая вышесказанное, гамильтониан неупорядоченной системы можно записать в виде

$$\mathcal{H} = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, i_1 \\ (i_1 = i \pm 1)}} T_0 a_i^\dagger a_{i_1}, \quad (1)$$

где a_i^\dagger , a_i — операторы рождения и уничтожения электронов на узле i , потенциал $\epsilon_i = 0$, если узел i занят атомом 1-го типа, и $\epsilon_i = E_1$, если узел занят атомом 2-го типа, T_0 — интеграл перескока между ближайшими соседними атомами внутри цепочки, который считается не зависящим от распределения атомов и для простоты принят равным единице. В результате спектр идеальной цепочки, состоящей из N атомов одного сорта с потенциалом $\epsilon_i = 0$, имеет вид

$$E_{m,N} = \cos(\pi m / (N + 1)), \quad (m = 1, 2, \dots, N), \quad (2)$$

т.е. лежит в интервале $(-1; 1)$.

Как и в работах [1–5], для расчетов будет использован метод Дина [11,12], который позволяет эффективно (с точки зрения затрат расчетного времени) находить электронные спектры даже для макроскопически длинных неупорядоченных цепочек.

Как обычно, анализ проведен сначала для случая малых концентраций атомов одного из сортов. При этом в области локальных уровней, где ситуация слабо отличается от колебательного спектра, более подробно проанализированы вопросы, связанные с фрактальным характером спектра. Основное же внимание уделено исследованию особенностей структуры спектра внутри квазинепрерывной области. А именно: анализу положений и характера особенностей, возникающих в области квазинепрерывного спектра, а также зависимости ширин возникающих запрещенных зон от концентрации и потенциала атомов второго типа.

2. Область локального уровня при малой концентрации одной из компонент

Как уже отмечалось, начнем рассмотрение спектра со случая, когда концентрация c одной из компонент мала. Для определенности будем считать, что такими примесями являются атомы с потенциалом $\epsilon_i = E_1$. На рис. 1 представлен характерный вид спектров неупорядоченной цепочки при различных значениях $E_1 > 0$ и концентрации $c = 0, 2$. Тонкой пунктирной линией на этом, как и на последующих рисунках, показан спектр идеальной цепочки, состоящей только из атомов основного типа с $\epsilon_i = 0$, который описывается известным выражением

$$\rho_0(E) = 1 / (\pi \sqrt{1 - E^2}). \quad (3)$$

Как видно на рис. 1, спектр неупорядоченной цепочки состоит из квазинепрерывной области, энергии которой соответствуют диапазону идеального спектра,

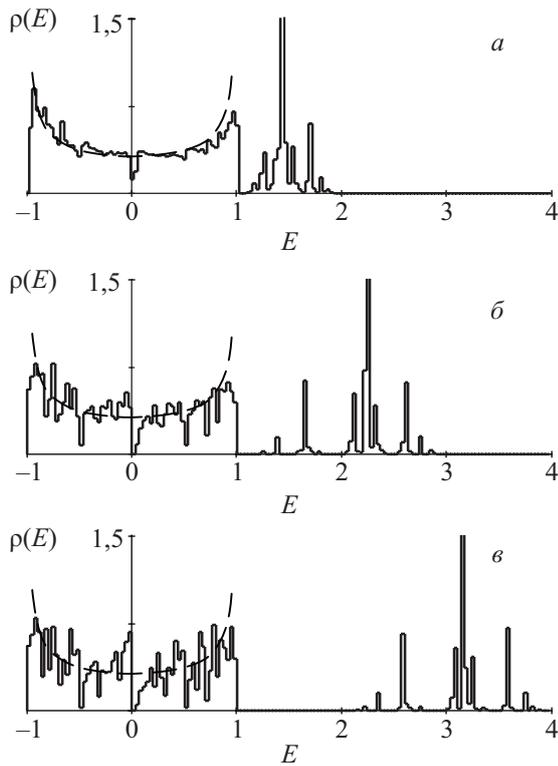


Рис. 1. Общий вид электронного спектра одномерной неупорядоченной цепочки. Пунктирной линией показан спектр идеальной цепочки. Концентрация примеси $c = 0,2$, потенциал примеси $E_1 : 1$ (а); 2 (б); 3 (в).

и области локальных уровней, находящихся справа от нее (далее всюду будем полагать, что $E_1 > 0$, поскольку при $E_1 < 0$ область локальных уровней лежала бы слева от основной зоны, а вся картина при тех же значениях $|E_1|$ была бы просто зеркальным отображением относительно вертикальной оси). Для рассматриваемой на этом рисунке все же сравнительно низкой концентрации примесных атомов и при небольших значениях потенциала примеси E_1 (рис. 1,а) зона квазинепрерывного спектра по своей форме напоминает исходную зону идеальной цепочки. Однако даже в этом случае спектр не является гладкой функцией: на нем хорошо различимы серии минимумов и максимумов, интенсивность которых растет по мере роста потенциала примеси (рис. 1,б и рис. 1,в). Структура этих неоднородностей детально будет проанализирована ниже, а сначала кратко рассмотрим плотность состояний в окрестности локального уровня ($E_1 > 1$).

Здесь спектр состоит из центрального, наиболее интенсивного уровня, который соответствует изолированной примеси с энергией E_{loc} , определяемой из решения уравнения

$$1 = \frac{E_1}{N} \sum_m \frac{1}{E_{loc} - E_{m,N}} = E_1 \int_0^1 \frac{1}{E_{loc} - \cos(\pi x)} dx = E_1 / \sqrt{E_{loc}^2 - 1} \quad (E_{loc} > 1). \quad (4)$$

Такой центральный уровень является точкой сгущения для других, менее интенсивных, уровней, энергии которых соответствуют двум взаимодействующим примесным центрам. Те, в свою очередь, являются точками сгущения для уровней кластера из трех взаимодействующих примесей и так далее. Такая фракталоподобная структура была подробно описана в наших предыдущих работах [2,3] для колебательного спектра одномерной неупорядоченной цепочки.

Проведенные в настоящей работе численные расчеты показывают, что общая структура как электронного, так и колебательного спектра в окрестности локального уровня в значительной степени аналогична. Поэтому в настоящей работе будут подробно рассмотрены только некоторые ранее не рассмотренные вопросы, связанные со свойствами самоподобия электронного спектра в области локальных уровней. При этом сначала отметим, что для электронного спектра, как и для колебательного, его структура в окрестности локальной моды остается неизменной при всех изменениях масштаба, доступных для вычисления. Так, на рис. 2 представлена окрестность локального уровня, отвечающего $E_1 = 3$ ($E_{loc} \approx 3,162$) при изменениях масштаба на двенадцать порядков. Хорошо видно, что при этом общий вид спектров действительно остается неизменным: имеется центральный уровень и сгущающиеся к нему боковые уровни, имеющие примерно одинаковую относительную интенсивности и взаимное

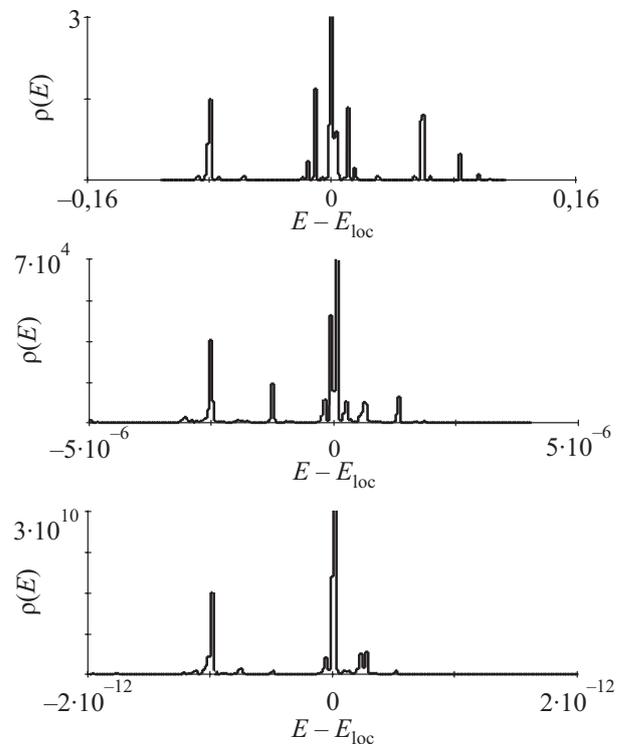


Рис. 2. Спектр в окрестности локального уровня, отвечающего $E_1 = 3$, выполненный в различных масштабах. Концентрация атомов второго сорта: $c = 0,2$. Число разбиений на каждом из представленных участков равно 200.

расположение между собой. Такое поведение можно описать следующим законом подобия. Рассмотрим некоторую область спектра по обе стороны от энергии локального уровня E_{loc} шириной Δ_0 и разобьем ее на n_0 равных частей (в данной работе всегда $n_0 = 200$). Найдем число уровней, попадающих в каждый такой участок, что, собственно, и показано на рис. 2, и определим отношение числа уровней $I_1(\Delta_0)$, попадающих в два центральных участка этой области, к общему числу уровней в области $\Delta_0 - I_0(\Delta_0)$. Несмотря на то, что сами величины $I_1(\Delta_0)$ и $I_0(\Delta_0)$ сильно зависят от Δ_0 , их отношение, как видно из примера, представленного на рис. 3,а, практически не зависит от Δ_0 при изменении последнего на 11 порядков.

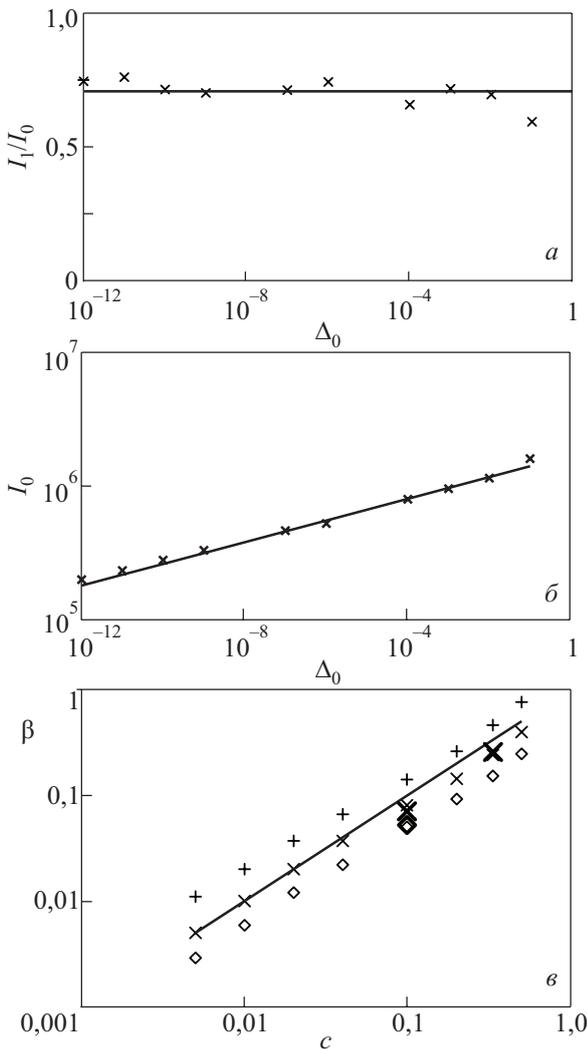


Рис. 3. Фрактальные характеристики электронного спектра вблизи локального уровня и показатель степени β в выражении (5). Зависимости отношения $I_1(\Delta_0) / I_0(\Delta_0)$ (а) и величины $I_0(\Delta_0)$ (б) от Δ_0 при $E_1 = 3$ и $c = 0,1$. Зависимость показателя β , отвечающего центральному пику, от концентрации при разных значениях потенциала примеси E_1 : 1 (+), 3 (x), 10 (\diamond) (крупные символы отвечают парным уровням) (в).

Следующим шагом, который можно сделать для описания фракталоподобного поведения спектра вблизи локального уровня, является определение зависимости $I_0(\Delta_0)$ (или $I_1(\Delta_0)$) от ширины выбранной области Δ_0 . Показатель β в степенной зависимости $I_0(\Delta_0)$ от Δ_0 :

$$I_0(\Delta_0) = A \cdot (\Delta_0)^\beta \quad (5)$$

в определенной мере может служить характеристикой размерности рассматриваемого здесь фрактала. На рис. 3,б опять в виде примера показана в двойном логарифмическом масштабе зависимость $I_0(\Delta_0)$ от Δ_0 для случая примесных атомов с энергией $E_1 = 3$ и концентрацией $c = 0,1$. Видно, что во всем весьма широком интервале изменения Δ_0 показатель β (наклон этой зависимости) оказывается примерно постоянным и равным c . Согласно выполненным здесь расчетам, этот показатель зависит как от концентрации примесей, так и от энергии E_1 , и лежит в интервале $0 < \beta < 1$. Зависимости величины β от концентрации в двойном логарифмическом масштабе показаны на рис. 3,в для трех значений энергии E_1 : 1,0; 3,0; 10,0. Видно, что с ростом энергии примесного атома величина β уменьшается, а ее зависимость от концентрации всегда носит линейный характер, по крайней мере, до $c \approx 0,25$. Для проверки общности полученных результатов в работе проведен расчет значений показателя β и для некоторых парных уровней спектра, которые, как отмечалось выше, также служат точками сгущений уровней более низкого ранга. Полученные значения β для трех значений параметров примесной системы приведены на рис. 3,в в виде более крупных точек. Видно, что с достаточной степенью точности значения показателя β для основного и парного пиков совпадают. Этот последний результат еще раз свидетельствует об универсальности фрактального поведения спектра вблизи локального уровня.

3. Структура спектра в области исходной зоны

3.1. Статистика распределения уровней внутри непрерывного спектра

Совершенно другую структуру имеет спектр внутри исходной зоны. Для идеальной цепочки все энергетические уровни на макроскопическом интервале спектра (на котором изменением плотности состояний можно пренебречь) расположены на одинаковом расстоянии друг от друга ΔE_0 :

$$\Delta E_0 = 1/(N\rho_0(E)), \quad (6)$$

где N — количество атомов в цепочке. Для неупорядоченной цепочки весьма важную роль играет функция $p(\Delta E)$, которая описывает статистическое распределение расстояний между двумя соседними уровнями.

Очевидно, что для идеальной цепочки на некотором макроскопическом интервале, относительно узком по сравнению с шириной спектра всей цепочки, распределение $p(\Delta E)$ является δ -функцией:

$$p(\Delta E) = \delta(\Delta E - \Delta E_0).$$

Рассмотрим теперь, как изменяется поведение функции $p(\Delta E)$ по мере увеличения концентрации одной из компонент. Численные расчеты показывают, что наличие даже весьма малого количества примесей, вплоть до одной примеси на многомиллионную цепочку, кардинально меняет характер этого распределения. Так, на рис. 4,*a* представлена гистограмма распределения расстояний между соседними уровнями на некотором достаточно произвольном участке спектра цепочки, состоящей из $N = 10^8$ атомов и содержащей всего одну примесь (число разбиений вдоль оси абсцисс на участке $0 < \Delta E < 2 \cdot 10^7$ составляет 50, а по оси ординат отложено число уровней, попавших в одну такую ячейку). Как хорошо видно, распределение даже в этом случае уже не является δ -образным пиком, как для идеальной цепочки, но имеет достаточно большую ширину и в какой-то мере оказывается симметричным относительно среднего расстояния между уровнями. При дальнейшем увеличении количества примесей пик распределения постепенно смещается в сторону меньших значений ΔE , приближаясь к экспоненциальному распределению с максимумом при $\Delta E = 0$, характерному для случайно распределенных уровней (рис. 4,*б, в*). Наконец, при внесении в рассматриваемую цепочку из 10^8 атомов двадцати и большего числа примесей (рис. 4,*г*) распределение $p(\Delta E)$ является практически таким, которое отвечает случайному распределению для одномерных систем:

$$p_{\text{ch}}(\Delta E) = \frac{1}{\Delta E_0} \exp(-\Delta E / \Delta E_0). \quad (7)$$

Как простой критерий случайности распределения можно выбрать величину q :

$$q = \int_0^{\Delta E_0} p(\Delta E) d\Delta E.$$

Для полностью случайного распределения $p_{\text{ch}}(\Delta E)$ значение $q_{\text{ch}} = (1 - 1/e) \approx 0,63$. Если применить этот критерий для оценки случайности распределений на рис. 4, то получим $q_1 = 0,49$ для одной примеси (рис. 4,*a*); $q_2 = 0,53$ для двух примесей (рис. 4,*б*); $q_4 = 0,57$ для четырех (рис. 4,*в*) и $q_{20} = 0,61$ для двадцати примесей (рис. 4,*г*).

Отметим здесь, что отсутствие «запрещенной» области в распределении $p(\Delta E)$ при $\Delta E \rightarrow 0$ даже для цепочек с очень малым количеством примесей отвечает наличию вырожденных или почти вырожденных

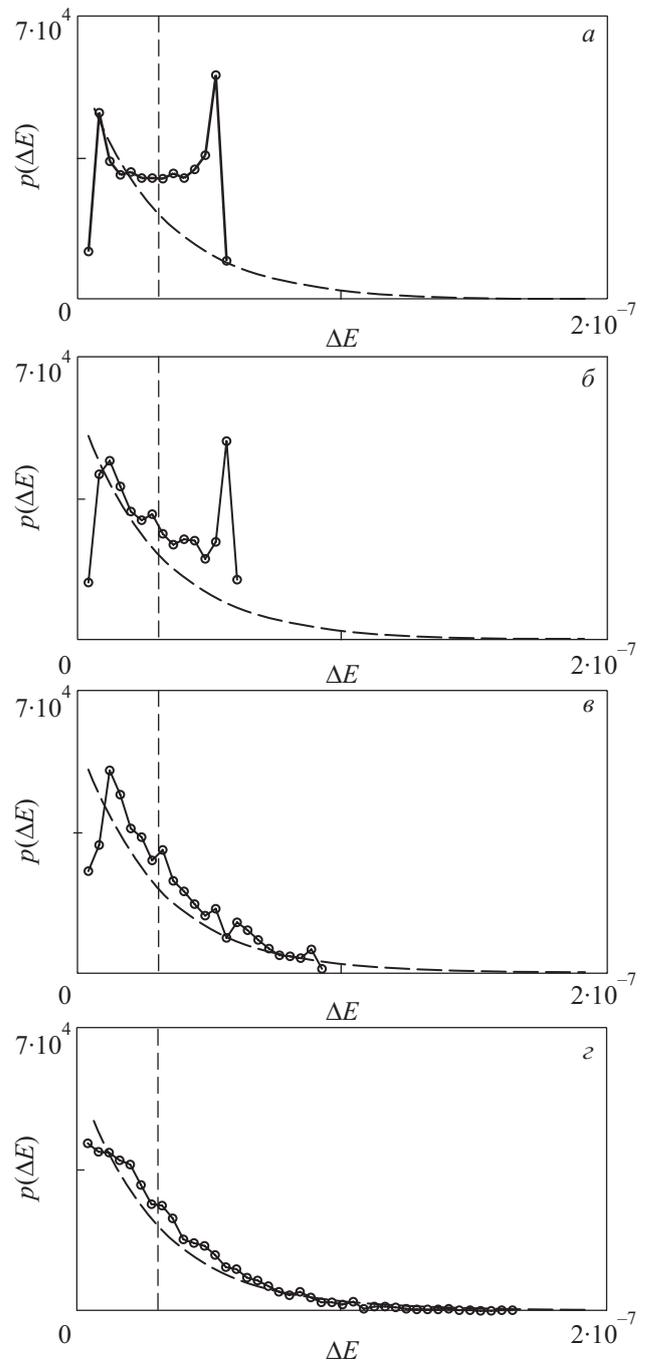


Рис. 4. Распределение расстояний между соседними уровнями в интервале энергий $E = 0,25 - 0,25008$; $E_1 = 3$; число атомов в цепочке $N = 10^8$. Кружками показаны численные значения, пунктирной линией — рассчитанные аналитически, вертикальной пунктирной — среднее расстояние (соответствует идеальной цепочке). Одна примесь (*a*); две примеси (*б*); четыре примеси (*в*); двадцать примесей (*г*).

состояний спектра. Это указывает на то, что в рассматриваемой неупорядоченной цепочке все состояния являются локализованными, поскольку именно для таких состояний взаимодействие, во всяком случае на больших расстояниях между центрами локализации, является пренебрежимо малым.

3.2. Особенности функции распределения в области квазинепрерывного спектра

Если же рассматривать область квазинепрерывного спектра в целом, то при относительно малой концентрации атомов второго сорта спектр в этой области, в основном, повторяет спектр исходной идеальной цепочки, однако в нем появляются серии особенностей в энергетической зависимости величины плотности состояний. При этом расчеты показывают, что положения этих особенностей не зависят ни от концентрации, ни от величины возмущения, вносимого атомами второго сорта. В то же время интенсивности особенностей, естественно, растут с увеличением как концентрации, так и величины потенциала примесных атомов.

При внесении в цепочку атомов примесей со сравнительно небольшим потенциалом $|E_1| < 1$ в спектре появляются серии неоднородностей, каждая из которых представляет собой рядом расположенные провал и пик (рис. 5,а). Положения этих особенностей, как уже отмечалось, не зависят от параметров примеси. Амплитуды провалов также не зависят от концентрации примесей, но их ширины растут с увеличением концентрации. Наиболее интенсивными такие особенности оказываются в центре зоны, вблизи $E = 0$. С ростом значений потенциала возмущений E_1 амплитуды провалов увеличиваются, однако пока $|E_1| < 1$ всюду в квазинепрерывной области плотность состояний остается ненулевой. Наконец, наступает момент, когда указанные амплитуды становятся настолько большими, что на месте неоднородности постепенно начинает открываться запрещенная зона. При этом по мере роста E_1 такая зона впервые появляется в центре исходной зоны вблизи $E = 0$. Как раз такой случай показан на рис. 5,б для $E_1 = 1,0$ и $c = 1/5$. Видно, что при данном значении E_1 запрещенная зона в области вблизи $E = 0$, по-видимому, только-только раскрылась, а ширина участка с $\rho(E) = 0$ весьма мала, так что ее определение даже для цепочек с $N = 10^{10}$ не очень надежно. При дальнейшем увеличении параметра E_1 открывается все большее число запрещенных зон, причем такое раскрытие наступает сразу для серий линий. Так на рис. 5,б,в представлено формирование еще двух серий запрещенных зон.

3.3. Положение особенностей внутри квазинепрерывного спектра

Представляет интерес определить значения энергий, которые отвечают положениям особенностей в квазинепрерывном спектре. Исходя из аналогии с рассмотренным в предыдущей работе [4] колебательным спектром линейной неупорядоченной цепочки, можно предположить, что и в данном случае при $c \ll 1$ указанные особенности будут находиться вблизи энергий, отвечающих спектрам разных относительно коротких

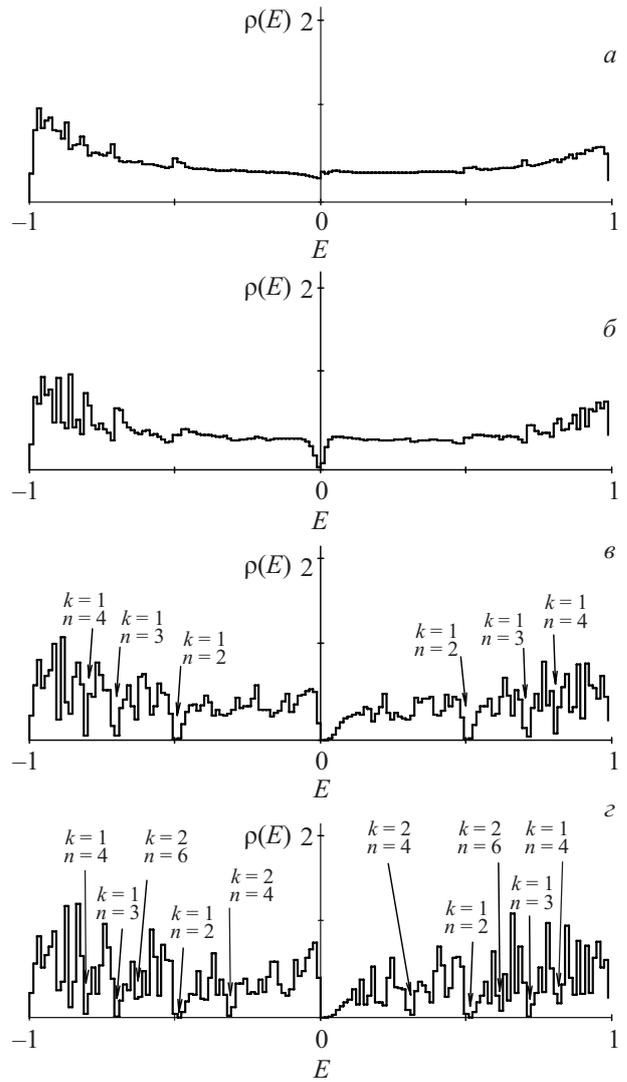


Рис. 5. Электронный спектр одномерной неупорядоченной цепочки внутри исходной зоны. Тонкими вертикальными линиями показаны энергии, отвечающие указанным значениям чисел n и k . Концентрация примеси $c = 0,2$, потенциал примеси E_1 : 0,7 (а); 1 (б); 2 (в); 3 (г).

упорядоченных изолированных цепочек, которые состоят только из атомов с потенциалом $\epsilon_i = 0$. Нетрудно показать, что уровни энергии $E_{m,n}$ такой короткой идеальной изолированной цепочки, состоящей из n атомов, определяются тем же выражением (2) только с заменой N на n . Таким образом, все n уровней в рассматриваемой цепочке являются невырожденными.

Ниже для анализа нам будет удобно записать энергетический спектр идеальной цепочки в несколько ином виде:

$$E_{k,n} = \pm \cos\left(\frac{\pi k}{n+1}\right), \tag{8}$$

где целочисленный индекс k теперь определен в области $1 \leq k \leq (n+1)/2$. При такой записи каждому значению k , кроме $k = (n+1)/2$, отвечают два симметричных относительно $E = 0$ уровня, а для нечетных

значений n имеет место также невырожденный уровень с энергией $E_{k,n} = 0$, отвечающий значению $k = (n+1)/2$.

Отметим, что выражения (2) и (8) при $n \gg 1$ можно сравнить с известным выражением для спектра длинной идеальной цепочки, состоящей из N атомов, с циклическими граничными условиями Борна–Кармана [13]:

$$E_{m_1, N} = \cos\left(\frac{2\pi m_1}{N}\right), \quad -N/2 \leq m_1 \leq N/2. \quad (9)$$

При этом, как в (2) и (8), спектр идеальной цепочки лежит в интервале от -1 до 1 , однако, в отличие от (2), (8), здесь каждый уровень оказывается двукратно вырожденным. Такое различие для достаточно длинной цепочки не сказывается на величине плотности состояний, но для определения положений особенностей спектра неупорядоченной цепочки, которые отвечают уровням энергии коротких цепочек, такое различие становится принципиально важным. Как показывают результаты численных расчетов, энергии всех упомянутых выше особенностей в спектрах неупорядоченных цепочек со всей доступной для вычисления точностью отвечают именно тем значениям, которые следуют из (2), (8).

Основываясь на результатах численного эксперимента, можно предложить следующее описание динамики открытия запрещенных зон в спектре неупорядоченной цепочки при увеличении потенциала E_1 примесных атомов. Первой (с ростом E_1), начинает формироваться особенность вблизи энергии $E_{k,n} = 0$ ($k = 1, n = 1$), на месте которой при $E_1 > 1,0$ образуется первая запрещенная зона (рис. 5,а). Далее при $E_1 > 2,0$ вблизи энергий $E_{k,n}$, определенных в (8), как в области $E > 0$, так и $E < 0$, формируется уже серия запрещенных зон с одним значением индекса $k = 1$ и разными значениями $n \geq 2$, т.е. отвечающих максимальным (по модулю) энергиям идеальных цепочек различной длины. Характер возникающего спектра и положения некоторых энергий этой серии с соответствующими значениями чисел k и n показаны на рис. 5,б. При дальнейшем увеличении потенциала примеси возникает все большее число запрещенных зон. Так, при выполнении условия $E_1 > 3,0$ открывается следующая серия, отвечающая $k = 2$ и $n \geq 4$ (рис. 5,в). Здесь можно отметить, что положение особенностей с $k = 2$ и нечетными значениями n совпадают с положением особенностей, отвечающих серии с $k = 1$, и они маскируются на этом фоне.

4. Структура неоднородностей внутри зоны

В более крупном масштабе структура спектра в окрестности особых энергий представлена на рис. 6. Так, на рис. 6,а можно видеть как изменяется форма особенности с энергией $E_{k,n} = 0$ ($k = 1, n = 2$) с увеличением потенциала примеси. А именно, при $E_1 = 0,5$

виден четкий максимум в области $E > 0$ и неглубокий минимум в области $E < 0$. При $E_1 = 1,0$ наблюдается практически симметричный провал с нулевой плотностью состояний посередине и, наконец, при $E_1 = 2,0$ наблюдается уже сформированная запрещенная зона, которая расположена в области $E > 0$. Аналогичная картина, как видно на рис. 6,б, имеет место и для особенности с энергией $E_{k,n} = 0,5$ ($k = 1, n = 2$). Однако запрещенная зона для этой энергии открывается при большем значении потенциала примеси, а именно при $E_1 \approx 1,5$.

Рассмотрим теперь более подробно характер раскрытия запрещенной области, т.е. возникновения области с нулевой плотностью состояний. Соответствующие расчеты момента «касания» дном провала

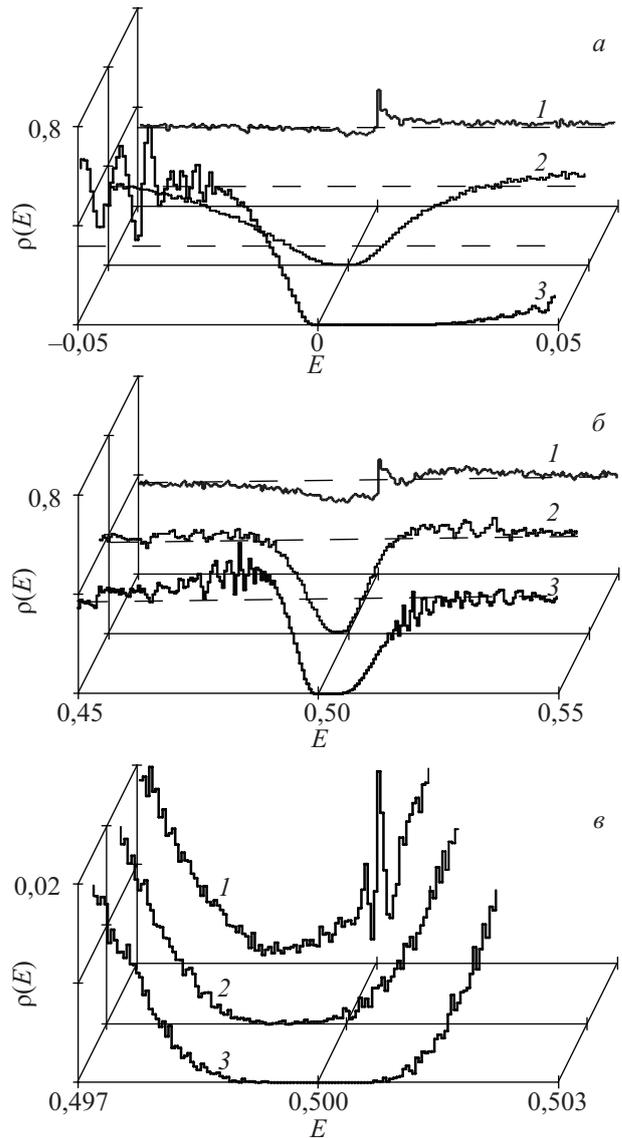


Рис. 6. Структура электронного спектра в окрестности особенностей. Концентрация примеси $c = 0,1$. Область вблизи энергии $E_{k,n} = 0$, отвечающей $k = 1, n = 1$, потенциал примеси $E_1 : 0,5$ (1); $1,0$ (2); $2,0$ (3) (а). Область вблизи энергии $E_{k,n} = 0,5$, отвечающей $k = 1, n = 2$, $E_1 : 1,0$ (1); $1,5$ (2); $2,0$ (3) (б). Та же область, $E_1 : 1,45$ (1); $1,47$ (2); $1,5$ (3) (в).

нулевой оси вблизи энергии $E_{k,n} = 0,5$ при приближении потенциала возмущения E_1 к значению 1,5 представлены на рис. 6,в. Как видно на этом рисунке (кривая 1), при $E_1 = 1,45$ спектр имеет еще не нулевой минимум, расположенный в области энергий несколько меньших номинального положения особенности $E_{k,n} = 0,5$. При $E_1 = 1,47$ (рис. 6,в, кривая 2) на численно рассчитанном спектре уже явно видна область с нулевой плотностью состояний, однако внутри нее все же «проскакивают» отдельные уровни. Положения этих уровней зависят от реализации распределения атомов разного сорта в цепочке, поэтому можно предположить, что в термодинамическом пределе плотность состояний в данной области имеет хотя и весьма малое, но все же не нулевое значение. И только при $E_1 = 1,50$ (рис. 6,в, кривая 3) наблюдается уже четко сформированная запрещенная зона, не зависящая от реализации цепочки. Таким образом, момент открытия запрещенной зоны с помощью численных расчетов может быть найден только с некоторой степенью точности.

Представляет интерес проследить зависимость момента образования запрещенной зоны от потенциала примеси E_1 для особенностей с различными значениями чисел k и n . На рис. 7 точками представлены результаты численных расчетов соответствующих значений $E_1(k,n)$ для двух первых серий особенностей, которые отвечают индексам $k=1$ и $k=2$ и различным значениям чисел n . Точки, которые соответствуют одной серии, соединены гладкой кривой линией с указанием соответствующего значения k . Для серии $k=2$ указаны данные только для четных значений n , так как положения особенностей, которые соответствуют нечетным n в этом случае совпадают с положениями особенностей для первой серии. На рис. 7 видно, что с ростом значения n и, соответственно, величины $E_{k,n}$ для формирования запрещенной зоны необходим все больший потенциал примеси. Для серии с $k=1$ соответствующие значения E_1 лежат в интервале от 1 до 2. Этот последний результат отличается от рассмотренного в работе [5], где особенности, отве-

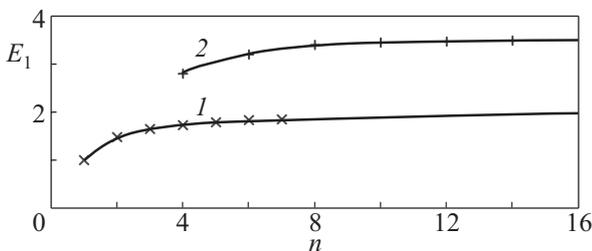


Рис. 7. Значения потенциала примеси E_1 , при которых происходит появление запрещенных зон вблизи энергий $E_{k,n}$, определенных в (8), для разных значений индексов k и n при $k : 1 (1), 2 (2)$.

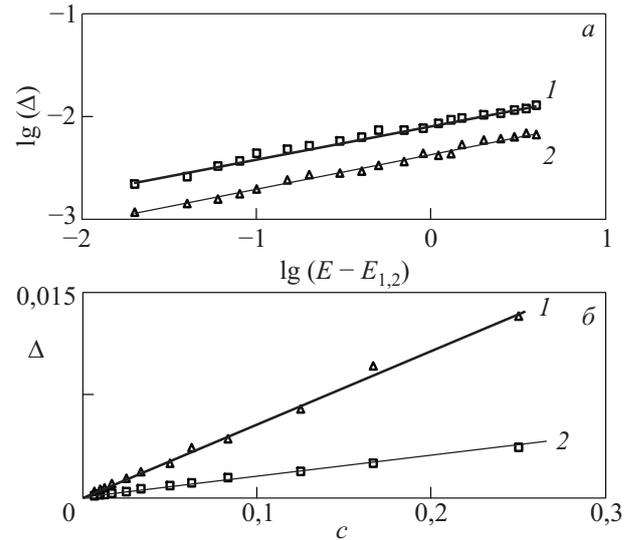


Рис. 8. Зависимость полуширины запрещенной зоны Δ , отвечающей особенности с индексами $k=1, n=2$, от потенциала примеси при $c : 0,2 (1), 0,1 (2)$ (а); от концентрации примеси при $E_1 : 4 (1), 1,54 (2)$ (б).

чающие одной серии, возникали при практически одинаковых значениях потенциала возмущений, вносимого примесями.

При превышении потенциалом примеси E_1 соответствующего критического значения $E_1(k,n)$ в области $E \geq E_{k,n}$ формируется запрещенная зона (см. рис. 6,а,б), ширина которой растет с ростом разницы $E_1 - E_1(k,n)$. Зависимость ширины запрещенной зоны Δ от величины $E_1 - E_1(k,n)$ представлена на рис. 8,а для особенности с энергией $E_{1,2} = 0,5$ ($k=1, n=2$) при двух значениях концентраций атомов второго сорта. Здесь видно, что в двойном логарифмическом масштабе точки графика с достаточной точностью ложатся на прямую линию. Для обеих выбранных концентраций наклон α этих линий оказался одинаковым ($\alpha \approx 0,33$), что означает одинаковую степенную зависимость Δ от $E - E_{1,2}$.

Рассмотрим также зависимость ширины запрещенной зоны Δ от концентрации. Для той же особенности $E_{1,2} = 0,5$ при двух фиксированных значениях величины $E_1 - E_1(k,n)$ такая зависимость представлена на рис. 8,б. Видно, что во всех случаях, как и следовало ожидать, эта зависимость оказывается практически линейной.

Остановимся кратко на характере возникающих особенностей спектра в области отрицательных энергий (при положительных значениях потенциала возмущения E_1). Можно отметить тот факт, что возникающие здесь особенности имеют в значительной мере такой же вид, что и в области $E > 0$, включая тот факт, что при тех же значениях индексов k и n критические значения потенциалов открытия запрещенной зоны

$E_1(k, n)$ не меняются. Именно такое поведение, в частности, обуславливает преимущество выбора систематики особенностей в виде (8), а не (2), поскольку индексы, описывающие спектр изолированной цепочки, оказываются одними и теми же как в области $E > 0$, так и в области $E < 0$. Однако, несмотря на то, что, согласно (8), все энергетические уровни особенностей расположены симметрично относительно $E = 0$, вся зона квазинепрерывного спектра неупорядоченной цепочки все же не является строго зеркально симметричной относительно этой точки (см. рис. 1). В этом смысле можно отметить тот факт, что при $E_1 > 0$ запрещенные зоны всегда находятся в области больших энергий относительно соответствующих значений $E_{k,n}$, т.е. формируются со стороны локального уровня.

5. Случай соизмеримых концентраций обеих компонент

Для того, чтобы продемонстрировать возможности используемого здесь метода расчета спектров в данном разделе кратко рассмотрим случай, когда концентрация обеих компонент в неупорядоченной цепочке соизмерима, а именно рассмотрим случай $c \approx 0,5$. Общий вид спектра при такой концентрации и различных значениях потенциалов E_1 атомов второго типа представлен на рис. 9 (еще раз напомним, что потенциал атомов первого типа остается неизменным и равным нулю). Тонкими линиями на этом рисунке показаны спектры двух идеальных цепочек, состоящих из атомов только первого и второго типов соответственно. Как видно на рисунке, в случае, когда разница потенциалов атомов разного сорта относительно невелика (см. рис. 9,а, отвечающий $E_1 = 0,5$), вид результирующего спектра в какой-то степени повторяет исходную зону, но с достаточно размытыми краями. Однако с ростом значения E_1 характер спектра существенно меняется. Действительно, уже при $E_1 = 1$ (рис. 9,б), картина спектра становится принципиально другой. В этом случае край спектра одной невозмущенной зоны совпадает с уже сформированной запрещенной зоной в области центра другой зоны, и в результате образуются два провала с раскрытием относительно узких запрещенных зон в областях энергий $E = 0$ и $E = 1$. При дальнейшем увеличении потенциала E_1 спектр становится все более структурированным, состоящим из большого количества пиков и запрещенных зон (рис. 9,в, $E_1 = 2$). Наконец, при достаточно больших значениях потенциала E_1 (см. рис. 9,г, $E_1 = 3$), когда невозмущенные зоны уже не пересекаются, в спектре неупорядоченной цепочки присутствуют две очень сильно структурированные области на месте исходных зон, разделенные широкой запрещенной зоной.

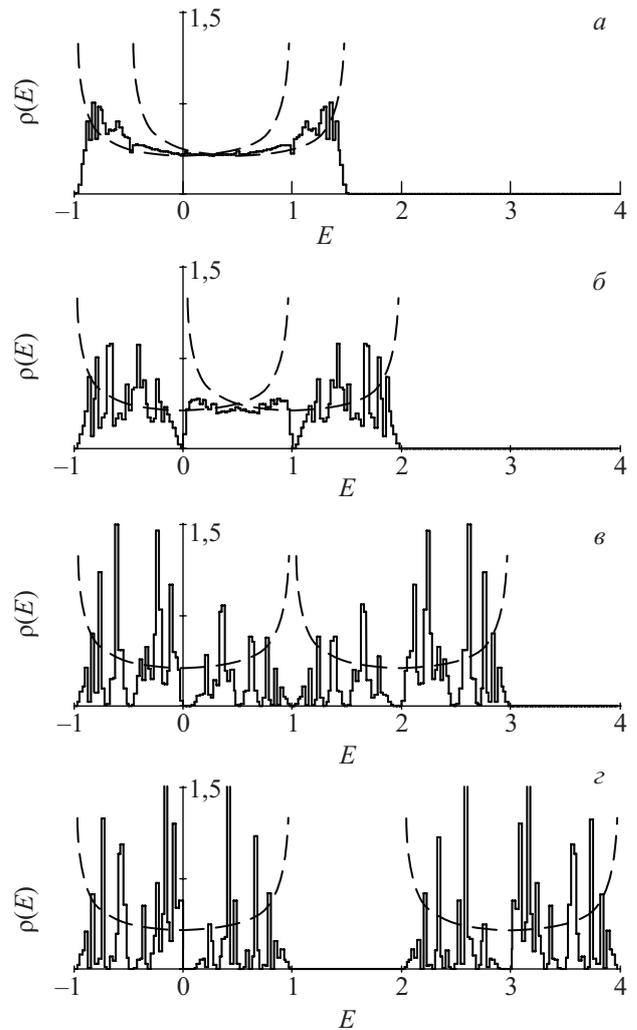


Рис. 9. Структура электронного спектра при одинаковой концентрации обеих компонент ($c = 0,5$) и следующих значениях потенциала E_1 атомов второго сорта: 0,5 (а); 1,0 (б); 2,0 (в); 3,0 (г).

6. Заключение

Представленные в настоящей работе результаты численных расчетов одноэлектронных спектров неидеальных бинарных линейных цепочек демонстрируют широкие возможности использования метода Дина для исследования тонких особенностей разного типа спектров неупорядоченных линейных объектов весьма большой (макроскопической) длины, порядка или превышающей 10^8 элементов.

Показано, что при малой концентрации одной из компонент электронный спектр, как и колебательный [2], в области локального уровня имеет четкую иерархию и обладает свойствами самоподобия, характерными для фракталов. А именно, при всех доступных в расчетах изменениях масштаба (порядка 10^{12}) общий вид спектра вблизи этих мод остается неизменным:

имеет место центральная мода, к которой сгущаются линии меньшей интенсивности.

Возможность определения для цепочек макроскопической длины положения отдельных уровней внутри квазинепрерывного спектра позволила определить статистику распределения уровней в этой области. При этом оказывается, что внесение даже одной примеси полностью нарушает эквидистантность уровней, свойственную идеальным цепочкам. С дальнейшим ростом концентрации примеси распределение энергетических интервалов между двумя соседними модами принимает экспоненциальный характер без провала в области малых интервалов, что отвечает хаотическому распределению уровней и локализованному характеру соответствующих состояний.

Наличие атомов разного типа существенно меняет и общий вид квазинепрерывной области спектра. Здесь возникает достаточно сложная структура, состоящая из серий резонансных минимумов и максимумов, положение которых сгущается к краям зоны. Такая структура все более отчетливо проявляется с увеличением разности потенциалов атомов обоих типов, а именно, по мере роста этой разности провалы в плотности состояний последовательно превращаются в запрещенные зоны, ширины которых линейно зависят от концентрации атомов второго сорта. Показано, что положения указанных особенностей спектра не зависят ни от величины разности потенциалов компонент, ни от их концентрации (если одна из них мала), а определяются собственными энергиями коротких изолированных идеальных цепочек, состоящих из атомов основного типа. В работе также проиллюстрирована общая структура спектра при соизмеримой концентрации обеих компонент.

В дальнейшем представляется интересным продолжить численные исследования электронных спектров длинных неупорядоченных линейных цепочек. В частности, рассмотреть, как влияет на характер особенностей в квазинепрерывной области не только различие положения исходных потенциалов компонент, но и параметров перескоков электрона между ними.

Авторы выражают благодарность Государственной целевой научно-технической программе Украины «Нанотехнологии и наноматериалы» № 1.1.1.3-4/10-Д за поддержку.

1. М.А. Иванов, Ю.В. Скрипник, В.С. Молодид, *ФНТ* **30**, 217 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 159 (2004)].
2. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **30**, 1086 (2004) [*Low Temp. Phys.* **30**, 815 (2004)].
3. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *Металлофизика и новейшие технологии* **27**, 19 (2005).

4. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **32**, 887 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 676 (2006)].
5. М.А. Иванов, В.С. Молодид, Ю.В. Скрипник, *ФНТ* **34**, 734 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 583 (2008)].
6. P. Dean, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).
7. И.М. Лифшиц, *ЖЭТФ* **44**, 1723 (1963).
8. И.М. Лифшиц, *УФН* **83**, 617 (1964).
9. J. Hori, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 940 (1964).
10. H. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.* **31**, 161 (1964).
11. P. Dean, *Proc. R. Soc. London* **A254**, 507 (1960).
12. P. Dean, *Proc. R. Soc. London* **A260**, 263 (1961).
13. A.A. Maradudin, E.W. Montroll, and G.H. Weiss, *Theory of Lattice Dynamics in the Harmonic Approximation*, Academic Press, New York (1963).

Electronic spectrum of the disordered binary linear chain

М.А. Иванов, В.С. Молодид, and Ю.В. Скрипник

Within the tight-binding model, numerical calculations of one-electron spectra of long disordered binary linear chains are performed, and the general structure of the resulting spectrum is determined. It is shown that in the domain of localized level the spectrum has a clear hierarchy and possesses self-similarity properties typical of fractals. The distribution of interlevel intervals inside the quasi-continuous spectrum is shown to have a random, exponential character without a gap in the area of small intervals. It is found that the general form of the density of states in the quasi-continuous region of the spectrum is changed. There appear a series of features, consisting of resonance minima and maxima, the positions of which are clustering at the band edges. With increasing the difference between the components energy levels, the minima are gradually transformed into forbidden bands, widths of which are in linear dependence on concentration. It is established that the positions of these features do not depend on the parameters of the components and their concentrations, but they are determined by the self energies of short chains of atoms of the main component. The overall structure of the spectrum at comparable concentrations of different atoms is also found.

- PACS: **73.22.-f** Electronic structure of nanoscale materials and related systems;
71.23.-k Electronic structure of disordered solids;
71.55.-i Impurity and defect levels.

Keywords: tight-binding model, one-electron spectrum, density of states, band-gap.