



**ТРУДЫ**

**Белорусского  
государственного  
технологического  
университета**

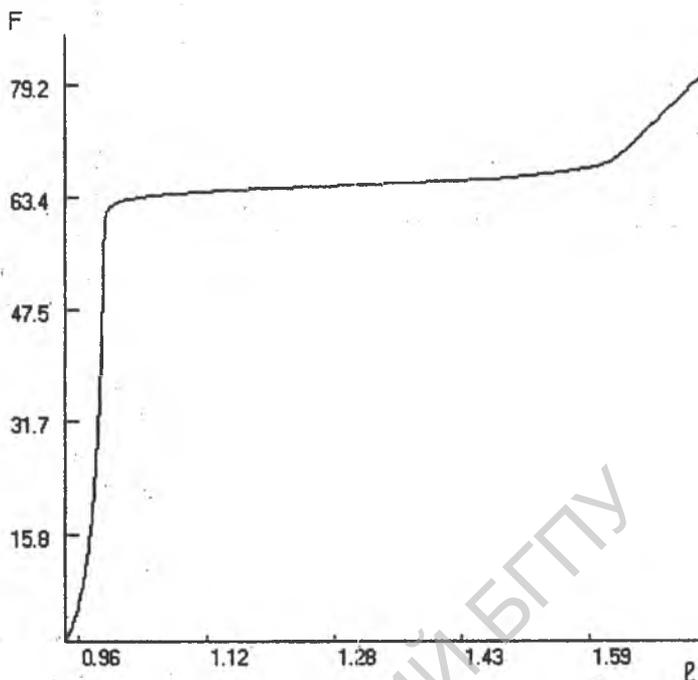
**Серия VI**

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ  
НАУКИ  
И ИНФОРМАТИКА**

**ВЫПУСК XI**

*Издается с июля 1993 года  
Выходит один раз в год*

**Минск 2003.**



Рисунок

## ЛИТЕРАТУРА

1. Clusel P. et al. DNA: An extensible Molecule // Science. 1996. V.271. P.791–795.
2. Кубо Р. Статистическая механика. – М.: Мир, 1967.
3. Haijun Zhou, Yang Zhang and Zhong-can Ou-Yang. Elastic property of single double-stranded DNA molecules: Theoretical study and comparison with experiments // Phys. Rev. E. 2000. V. 62. N 1. P.1045–1058.

УДК 537.633

В.Р. Соболев, вед. науч. сотрудник; О.Н. Мазуренко, науч. сотрудник;  
Н.В. Францкевич, преподаватель

### ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ВЕРОЯТНОСТИ ПРИМЕСНОГО РАССЕЯНИЯ БЛОХОВСКОГО ЭЛЕКТРОНА

Influence of superposition of transition amplitudes in intermediate states on probability of electron-impurity scattering is analyzed. The scale of the nonlinear concentration inclusion is determined during a relaxation from off-diagonal matrix elements of energy of interaction.

В ряде случаев применение понятия волнового пакета позволяет представлять электроны как классические частицы, которые имеют и координату  $r$ , и квазиимпульс  $p$ . Электронные явления в таком приближении рассматривают, используя неравновесную функцию распределения  $f$  в фазовом пространстве  $p$  и  $r$ . Полное изменение  $f$  с течением времени выражается производной  $df/dt$  и происходит из-за столкновений частицы с другими электронами, фононами и дефектами кристаллической структуры,

включающими примесные атомы. Производная  $df/dt$  равна интегралу столкновений, представляемому как отношение неравновесной добавки в функции распределения к среднему времени между столкновениями частиц  $\tau$ , которое вводят феноменологически. Введение времени  $\tau$  вызвано сложностью описания процесса рассеяния частиц на дефектах, поскольку способы расчета интеграла столкновений электронов существуют только для ограниченного числа частных случаев [1].

При определенных условиях волновые свойства электронов оказывают влияние на перенос заряда, изменяя соотношения, полученные в приближении квазиклассических представлений. Особенно подвержены влиянию волнового характера движения частиц образцы, у которых, по крайней мере, один из линейных размеров мал по сравнению с длиной фазовой когерентности волновой функции. В подобных условиях квантовая поправка в проводимость может достичь значительной величины и возможна локализация электронных состояний. Такие эффекты изучают различными методами, в том числе и применяя классические подходы, например, при определении флуктуаций сопротивления, связанных с корреляцией последовательных актов рассеяния на разных примесях [2, 3].

В данной работе анализируется электрон-примесное взаимодействие в достаточно малых по объему образцах с учетом вклада в вероятность рассеяния недиагональных матричных элементов энергии взаимодействия электрона, которые увеличивают интеграл столкновений. Задача решена в приближении кинетического уравнения при слабом взаимодействии электрона с примесью. Используется известная формула для вероятности рассеяния электрона на примесном немагнитном атоме:

$$\frac{2\pi}{\hbar} \int |U_{pp'}|^2 \delta(\varepsilon(p) - \varepsilon(p')) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} V. \text{ Здесь } U_{pp'} - \text{матричный элемент энергии взаимодей-$$

ствия с примесями, которые занимают положения  $R_i$ , т.е.  $U(r) = \sum_i u(r - R_i)$ ;  $V$  - объем

образца;  $d^3 p$  - элемент объема импульсного пространства;  $\hbar$  - постоянная Планка. Вероятность рассеяния электрона из состояния с квазиимпульсом  $p$  в состояние  $p'$  при упругом взаимодействии представляют как произведение экспоненциальной функции и дельта функции, обеспечивающей закон сохранения энергии:

$$\frac{2\pi}{V\hbar} \int |u_{pp'}|^2 \sum_{i,k} \exp(R_i, R_k) \delta[\varepsilon(p') - \varepsilon(p)] \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}; (R_i, R_k) = -i(k - k')(R_i - R_k). \text{ Здесь пред-}$$

полагается, что примесные атомы по своему силовому воздействию на электрон равноценны и случайно распределены по объему. В предположении однородного электрического поля через интегрирование по энергии для системы электронов с учетом функции распределения и принципа запрета Паули получают выражение для вероятности рассеяния. Поле выбирают достаточно слабым, чтобы можно было неравновесную поправку к электронной функции распределения представить как линейную функцию, что после усреднения по изоэнергетической поверхности, которая принимается изотропной, позволяет представить обратное время  $\tau$ .

$$\tau^{-1} = \int W(\varphi)(1 - \cos\varphi) \sum_{i,k} \exp(R_i, R_k) \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (1)$$

$$W(\varphi) = \pi \hbar^{-1} |u(\varphi)|^2 v(\varepsilon) V^{-1}; \quad v(\varepsilon) = \frac{2}{(2\pi \hbar)^3} \int \frac{dS}{4\pi}.$$

Здесь  $\varphi$  – угол между векторами  $p$  и  $p'$ , индексы  $i$  и  $k$  в (1) независимо пробегает значения от единицы до  $N_p$  ( $N_p$  – число примесных атомов). Таким образом, в двойной сумме  $S = \sum_{i,k} \exp(R_i, R_k)$  имеется всего  $N_p^2$  членов. Для совпадающих значений индек-

сов указанная часть суммы  $S$  равна  $N_p$ . Это принимается за конечный результат, который означает усреднение вероятности рассеяния по положениям атомов примеси, если  $N_p$  невелико и объем велик. Фактически это отвечает гипотезе беспорядочных фаз, обсуждаемой Коном и Латинжером, которая позволяет диагонализировать матрицу плотности. Исходным положением для принятия такой точки зрения является наличие сильной пространственной осцилляции амплитуд вероятности рассеяния. Для образцов малых объемов игнорирование вклада недиагональных членов двойной суммы не совсем обосновано, поскольку степень осциллирования амплитуд от удаленных атомов примеси уменьшается и их вклад в вероятность рассеяния может быть заметным [4, 5]. Отметим, что попытка учесть недиагональные элементы двойной суммы через процедуру суммирования по объему, что эквивалентно упоминавшемуся усреднению, не всегда является успешной. Действительно, суммирование по одному из индексов через интеграл вида

$$I \cong \iiint \exp[i(k - k')R] R^2 \sin\theta d\theta dR d\varphi \quad (2)$$

можно провести, используя разложение экспонент в бесконечный ряд

$$I \cong \iiint \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) J_l(kR) P_l(\cos\theta) R^2 \sin\theta d\theta dR d\varphi. \quad (3)$$

Здесь  $J_l(kR)$  – сферические функции Бесселя;  $P_l(\cos\theta)$  – полиномы Лежандра;  $k$  – длина изменения волнового вектора электрона при рассеянии ( $k = |k - k'|$ );  $\theta$  – угол между волновым вектором ( $k - k'$ ) и  $R$ . Интеграл (3) при суммировании по углу  $\theta$  приводит к функции, которая определяется через полином Лежандра нулевого порядка и после интегрирования по радиальной компоненте может быть представлена

$$f(kR) = 4\pi R^3 \frac{-kR \cos(kR) + \sin(kR)}{(kR)^3} = 4\pi R^3 F. \quad (4)$$

Здесь координата  $R$  отвечает пределам интегрирования от среднего расстояния между атомами примеси  $\Delta R$  до размера образца. Следует отметить, что физический смысл в (4) имеет область решений только в случае  $kR < 1$ , что подтверждается видом функции  $F$  (см. рисунок). Это означает, что использовать (4) возможно в случае  $k - k' \rightarrow 0$ , т.е. при сверхмалом угловом рассеянии, когда волновой вектор не изменяется и частное от деления (4) на объем, приходящийся на один атом примеси, равно  $N_p$ .

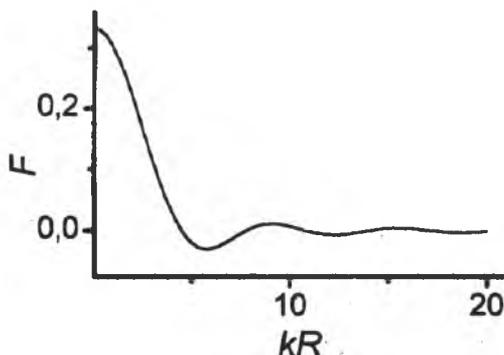


Рис. Осцилляционная зависимость функции  $F$  от безразмерного параметра  $kR$  по результатам вычисления интеграла  $I$

Чтобы оценить вклад недиагональных элементов, рассмотрим входящие в анализируемую сумму  $S$  элементы:

$$\exp[-i(k-k')R_{i,k}\cos\theta_{i,k}]. \quad (5)$$

Здесь  $\theta_i$ ;  $\theta_k$  — углы между векторами  $(k-k')$  и  $R_i$  или  $R_k$  соответственно. Естественно, что для таких значений углов  $\theta_i$  и  $\theta_k$ , которые обеспечивают малость скалярных произведений  $((k-k')R_i)$ , т.е.  $(k-k')R_i\cos\theta_i$ , подынтегральная функция даст конечный вклад. Если значение фазы, связанное с  $\cos\theta_i$ , зафиксировать, взяв его некоторую среднюю величину  $\cos\theta'$ , и провести суммирование по индексу  $i$ , представив экспоненты через тригонометрические функции, получаем выражение

$$S' = \sum_i \exp[-i(k-k')R_i\cos\theta] \cong \frac{\sin\left[\left(N_p + \frac{1}{2}\right)(k-k')\Delta R\cos\theta'\right]}{2\sin\left[\frac{(k-k')\Delta R}{2}\cos\theta'\right]} - \frac{1}{2} - i \frac{\cos\left[\frac{(k-k')\Delta R}{2}\cos\theta'\right] - \cos\left[\left(N_{ip} + \frac{1}{2}\right)(k-k')\Delta R\cos\theta'\right]}{2\sin\left[\frac{(k-k')\Delta R}{2}\cos\theta'\right]} \quad (6)$$

Вторая сумма  $S'' = \sum_k \exp[i(k-k')R_k\cos\theta']$  по сути является выражением, комплексно сопряженным (6). Поскольку фаза функций в  $S'$  и  $S''$  и степень их осциллирования определяются величиной  $\cos\theta$ , можно оценить то значение угла  $\theta$ , в пределах которого осцилляции отсутствуют. Очевидно, весь искомый диапазон значений  $\theta$  лежит вблизи нормали к  $k-k'$  и ее можно определить выражением

$$\left|\theta' - \frac{\pi}{2}\right| \leq \frac{\pi}{2} \frac{1}{\left(N_p + \frac{1}{2}\right)(k-k')N_p^{\frac{1}{3}}\Delta R}. \quad (7)$$

Из (7) следует, что величины  $N_p$  и  $\Delta R$  не должны быть большими и малость  $N_p$  и  $\Delta R$  по сути означает небольшой линейный размер, когда даже самые удаленные между

собой примеси дают конечный вклад в сумму  $S$ . В таких условиях суммирование по несовпадающим индексам  $i$  и  $k$  дает  $S \propto N_p^2$ .

Поскольку диапазон углов  $\theta'$  соответствует малой области, то можно произвести усреднение вероятности рассеяния на атомах с неповторяющимися индексами, учитывая, что конечный результат слабо зависит от процедуры усреднения. Это происходит потому, что только для малой области углов  $d\theta'$  вклад от недиагональных элементов в вероятность рассеяния пропорционален  $N_p^2$ , а для всех остальных он отсутствует. Когда основной вклад происходит от малой области углов, вероятность этих актов рассеяния пропорциональна эффективному телесному углу  $d\Omega \cong 2\pi \sin\theta' d\theta' \cong d\theta'$  ( $\theta \cong \pi/2$ , полярная ось направлена вдоль  $k - k'$ ), отнесенному к полному телесному углу. В результате вклад недиагональных элементов составляет порядка  $N_p^{2/3} / [(k - k')\Delta R]$ . Соответственно среднее обратное время между столкновениями электронов можно представить как функцию, пропорциональную традиционному вкладу в приближении гипотезы хаотических фаз, и дополнительной поправки, связанной с проявлением волновых свойств частиц через недиагональные элементы матрицы плотности:

$$\tau^{-1} \propto N_p \left( 1 + c^{1/3} / N_p^{1/3} \right). \quad (8)$$

Здесь  $c$  – концентрация примесных атомов. Из выражения (8) следует, что при заданном  $N_p$  дополнительный вклад уменьшается с увеличением размеров образца. При заданной концентрации примесей уменьшение их количества означает уменьшение числа собственных атомов, что активизирует проявление волновых свойств носителей заряда. Возрастание при заданной концентрации числа примесей означает увеличение размеров с понижением значения эффективного угла  $\theta'$ .

Таким образом, для малых по объему образцов рассеяние электронов происходит через промежуточные базисные состояния, при которых возможна суперпозиция амплитуд, когда вероятность перехода есть не только сумма вероятностей рассеяния на всех примесных атомах, но и содержит интерференционные поправки, вытекающие из операции возведения в квадрат суммы амплитуд переходов.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф00-073).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Абрикосов А.А. Основы теории металлов. – Москва: Наука, 1987. – 520 с.
2. Гальперин Ю.М., Козуб В.И. Классическая мезоскопика // ЖЭТФ, 1991. – Т.100. – Вып. 1(7). – С. 323 – 333.
3. Kozub V.I., Krokhin A.A. Classical mesoscopic conductance fluctuations in systems with boundary scattering // J. Phys.: Condens. Matter, 1993. – Vol. 5. – P. 9135 – 9144.
4. Sobol V.R., Mazurenko O.N., Solonovich V.K., Kukharenko L.V. The conductivity fluctuations in mesoscopic systems // Herald Russian Acad. Tech. Sci, 1994, – Vol. 1. – N 7. – P. 699 – 705.
5. Sobol V.R., Mazurenko O.N. Charge transport in impure metal // Physics, Chemistry and Application of Nanostructures. – Minsk, 1995. – P. 266 – 267.