

И.Х.Жарекешев

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Алматы

АЛГОРИТМ ДЕЛЕНИЯ ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Электрондық спектрді сараптаудың жетілдірілген есептік тәсілі дайындалып берілген. Реттелмеген қатты денеде энергия деңгейлерінің статистикасы зерттелген. Диагональдық реттелмеулі тығыз байланыстағы екі өлшемді моделі үшін спектордың алгоритмдік бөлінуі қарастырылған. Кең көлемді нанокластерлерде, мәселен, бір миллионға дейінгі атомы бар графендер сияқты, энергияның кванттық деңгейі есептеліп шығарылған. Біздің зерттеулеріміз нанокластердің көлемі өскенде Вигнер спектрі статистикасының Пуассон спектрі статистикасына ауысатынын көрсетті.

A numerical method for the analysis of the electron spectrum is developed. The energy level statistics is considered in the disordered solid state. The division algorithm of the spectrum for two-dimensional tight-binding model with the diagonal disorder is applied. Quantum energy levels for large nanoclusters, such as graphenes containing up to million atoms are calculated. Our results show a transition of spectral statistics from Wigner towards Poisson statistics when the cluster size increases.

Введение

Вычисление дискретного электронного спектра полупроводниковых наноструктур в последнее время привлекает большое внимание в физике конденсированного состояния. В первую очередь это связано с тем, что вследствие квантово-размерных эффектов на масштабах долей микрона расстояние между электронными уровнями становятся меньше, чем температура (kT) и меньше, чем неупругая энергия рассеяния межэлектронного взаимодействия ($1/\tau_m$). Как раз такая ситуация реализуется в экспериментальных образцах наноразмера, порядка 2–10 Å, уже при комнатной температуре. Поэтому теоретическое исследование дискретных уровней энергии электронов, их положение по отношению друг к другу, а также общее распределение уровней энергии всей квантовой системы (статистика спектра) являются важной и актуальной задачей современной полупроводниковой наноэлектроники. Перспективными подходами к пониманию этой проблемы служат не только общие аналитические методы (построение формализма на основе приближенных теоретических моделей), но и прямые численные методы, основанные на точном вычислении физических наблюдаемых (такие как ренорм-групповые методы и точная диагонализация). Одним из этих методов является алгоритм деления, впервые примененный в ядерной физике для нахождения времен и сечений рассеяния на тяжелых сложных ядрах. В настоящей работе алгоритм деления впервые используется для спектральных корреляций в полупроводниковых нанокластерах.

В большинстве случаев компьютерный расчет полного электронного энергетического спектра и соответствующих волновых функций квантовых образцов сильно затруднен ввиду определенных ограниченных возможностей компьютеров (предел оперативной памяти и максимальное быстродействие процессоров). Зачастую размеры систем, которые поддаются надежному расчету, не превосходят нескольких десятков атомов в нанокластерах. Дальнейшую трудность представляют так называемые гамильтонианы с беспорядком, описывающие реальные физические образцы с различного рода примесными атомами. Точная диагонализация таких гамильтонианов еще больше снижает предельный масштаб образцов конечных размеров, которые поддаются точному численному описанию.

С другой стороны, определение физических свойств макроскопически больших квантовых систем требует знания спектральных характеристик в термодинамическом пределе только в очень узкой области энергии. Эта область энергии достаточна для формирования большинства транспортных величин (таких как проводимость, теплопроводность, магнитная восприимчивость, оптические величины). Ширина этой области энергии δ определяется температурой или обратным временем рассеяния, или энергией Таулесса, или каким-либо другим типичным масштабом энергии, характерным для данного типа задачи. Как правило, она намного меньше, чем ширина спектра всей системы. Только незначительная часть дискретных уровней энергий вокруг уровня Ферми сконцентрирована в этой области. Поэтому нет необходимости вычислять полный набор дискретных значений энергий электрона и соответствующих волновых функций. Это, в свою очередь, означает, что проводить полную диаго-

нализацию всей системы излишне. Другими словами, поиск собственных значений и собственных функций матричного гамильтониана может быть сконцентрирован только в области δ . За счет ограничения области вычисляемых энергий можно выиграть в пользу больших размеров исследуемых систем, и тем самым направить компьютерные мощности в сторону увеличения линейных масштабов, с тем, чтобы максимально приблизиться к реальной экспериментальной ситуации, когда число атомов в нанокластере насчитывает от 10^3 до 10^6 .

Спектральные корреляции

Одним из мощных методов, в котором успешно используется упомянутая выше идея, является широкоизвестный метод Ланцоша [1; 2]. Его преимущество перед другими методами заключается в том, что он позволяет вычислять не только единичные (отдельно стоящие) уровни энергии, но и собственные состояния, как в интерьере, так и на удаленных границах спектра. Другой метод, который берет свое начало от известного формализма ренормировочно-группового анализа, разработанного для проблемы Кондо, называется методом Вильсона [3]. Его модифицированная версия применялась к неупорядоченным гамильтонианам, чтобы определить кондактанс G двумерной модели Андерсона [4]. Основная цель настоящей статьи — продемонстрировать, что подобный алгоритм также может быть успешно имплементирован для вычисления взаимных корреляций уровней энергии в электронных спектрах хаотических систем.

Общепринято, что спектральные корреляции описываются вероятностным распределением $P(s)$ расстояний между ближайшими уровнями s [5]. Мы представляем здесь точные результаты $P(s)$ для двумерной модели Андерсона, общие размеры которой достигают 1024×1024 узлов решетки. В качестве проверки мы вычислили функцию скейлинга $\beta(G)$ кондактанса, который определяется как смещение уровней энергии при изменении граничных условий. Точное определение кондактанса было введено в мезоскопическую физику Таулессом. Ему удалось найти выражение для статического кондактанса квантовой системы конечных размеров через некоторый масштаб энергии, который является мерой чувствительности дискретных уровней энергии электрона по отношению к изменению условий на границах образца. Этот масштаб энергии может служить мерой для определения ширины интервала энергий δ в спектре.

Если размеры системы намного меньше, чем длина локализации, то ожидается, что распределение расстояний между ближайшими уровнями $P(s)$ дается формулой Вигнера [6]

$$P_w(s) = \frac{\pi s}{2} \exp(-\pi s^2 / 4), \quad (1)$$

благодаря тому, что существует квантово-механическое отталкивание между уровнями энергии. Расстояния между уровнями s измеряется в единицах среднего расстояния Δ . Если размер системы L увеличивается или степень беспорядка хаотического потенциала W усиливается, то общеизвестно, что испытывает фазовый переход к локализации, а распределение $P(s)$ должно испытывать переход от распределения Вигнера $P_w(s)$ к распределению Пуассона $P_p(s) = \exp(-s)$, как только длина локализации ζ становится меньше размера системы L . В этом пределе уровни энергии являются полностью нескоррелированными, так как перекрытие между хвостами волновых функций локализованных состояний электрона становится экспоненциально малым. Используя численное моделирование по методу деления, мы показываем, что при увеличении размера L функция распределения $P(s)$ межуровневых расстояний действительно изменяется от функции Вигнера к функции Пуассона, причем это изменение в двумерной системе происходит непрерывно, в отличие от перехода $P(s)$ в трехмерной системе, где наблюдается разрывный скачок. Наши результаты полностью согласуются с предположением [5], что в двумерных образцах с неупорядоченным примесным потенциалом все электронные состояния являются локализованными.

Алгоритм деления

Модель Андерсона с диагональным беспорядком представлена в виде гамильтониана

$$H = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + I \sum_{i,j \neq i} |i\rangle\langle j|, \quad (2)$$

где $|i\rangle$ обозначает состояния электрона на узле i .

Первый член в сумме соответствует потенциальной энергии, второй — кинетической. Удельные энергии ε распределены случайным образом вокруг нуля согласно равномерной функции распределе-

ния с шириной W . Второй член суммы содержит интегралы обмена только между ближайшими соседними узлами i и j в решетке.

Главная идея метода деления заключается в том, чтобы увеличение в масштабе длин компенсировать за счет соответствующего уменьшения в масштабе энергий, изучая поведение спектральных корреляций в последовательно сужающейся области энергии. Двумерная решетка линейного размера L практически разбивается на меньшие квадратные ячейки одинакового размера l , которые являются статистически независимыми друг от друга. Далее гамильтониан диагонализуются с наложением открытых граничных условий. Таким образом, вычисляются собственные значения E_α и собственные волновые функции $|\alpha\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$ для каждой ячейки. Выбираются только такие m собственные значения, которые наиболее близки к заданной точке в спектре E . Как правило, эта спектральная точка и есть уровень Ферми $E = E_F$. Остальные собственные значения, отличные от выбранных, и соответствующие им собственные волновые функции в дальнейшем отбрасываются. Затем четыре ячейки группируются вместе, чтобы образовать новую квадратную ячейку размером $2l$. Используя матричные элементы переходов между граничными узлами соседних ячеек, можно вычислить гамильтониан ячейки следующего, большего размера, который будет выражаться через собственные значения и собственные вектора гамильтониана ячейки меньшего размера. Так, продолжая последовательное удвоение размера ячейки в $l \rightarrow 2l$, $2l \rightarrow 4l$ и т.д., можно итеративным путем достичь достаточно больших размеров.

Для этого мы использовали «усеченный» набор собственных электронных состояний таким образом, чтобы секулярные матрицы больших ячеек имели ранг $4m \times 4m$. Диагональ матрицы состоит из собственных значений E_α ($\alpha = 1, \dots, 4m$), в то время как недиагональные матричные элементы составляют следующим, отличным от стандартного метода способом. В представлении узельных состояний недиагональная часть начального гамильтониана содержит только те ненулевые матричные элементы ($I = 1$), которые соответствуют ближайшим соседним узлам (2). Поэтому матричные элементы переходов между состояниями $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$ ячеек i и j даются выражением

$$V_{\alpha\beta}^{jk} = \sum_i \alpha_i^{(j)} \beta_i^{(k)} \quad (3)$$

Это суммирование проводится по всем узлам, расположенным на противоположных границах двух спаренных ячеек. Результирующие секулярные матрицы опять диагонализуются. Новый набор уровней энергий и соответствующие им собственные функции являются приближениями к точным решениям гамильтониана. Причем эти приближения сходятся к своим пределам по теории возмущений, так как размер гильбертова пространства квадратной решетки размером $2l$ усечен. Снова проводится очередная итерация, спектр укорачивается от $4m$ до m уровней, которые наиболее близки к заданной энергии $E = E_F$, и вся процедура с удвоением линейного размера ячеек повторяется. В этом, по сути, и заключается алгоритм деления.

В то время как на каждом шаге итерации размер системы увеличивается, ранг секулярной матрицы, которую необходимо численно диагонализировать, остается постоянным — $4m \times 4m$. На конечном этапе, когда последний шаг итерации приводит к $2l = L$, на систему накладываются периодические граничные условия. Таким образом, за счет пренебрежения квантовых состояний, отстоящих по шкале энергии достаточно далеко от интересующей энергии Ферми, можно достичь произвольно большого размера системы. Единственным ограничением является быстродействие имеющихся компьютеров.

Применяя теорию возмущений, Ли ранее доказал [4; 5], что эффект усечения спектра приводит к значительному смещению от одной случайной реализации к другой, которая также принадлежит к тому же самому статистическому ансамблю. Разумно предположить, что спектральные корреляции также не подвергаются существенному изменению вследствие применения алгоритма деления. Следовательно, этот алгоритм может предоставить информацию не только о средних значениях, но и о спектральной статистике. В качестве дополнительной особенности нужно отметить, что из-за фиксированного числа неотброшенных состояний вблизи E рассматриваемый интервал энергии сужается по закону L^{-2} с увеличением размеров системы. Статистика уровней энергии может изучаться в очень узкой области энергий. Тем самым можно избежать проблему перемешивания локализованных и пространственных состояний, которая существенно усложняет численную задачу. Хотя метод деления не применим для получения точных значений уровней энергии всего спектра, его преимущество очевидно для вычисления правильных решений спектральной статистики в узких интервалах энергии, централизованных на уровне Ферми.

Распределение межуровневых интервалов

Используя алгоритм деления, описанный выше, мы вычисляем функцию распределения расстояний между соседними дискретными уровнями $P(s)$ для двумерных систем различных размеров L и для нескольких значений степени беспорядка W примесного потенциала. В начале берутся 16384 ячеек размером $l = 8$. Все линейные размеры выражаются в длинах постоянной кристаллической решетки a . Затем производятся итерации до тех пор, пока не достигается максимальный размер $L = 1024$. На каждом шаге итерации берутся только $m = 25$ собственных значений и собственных волновых функций, ближайших к центру зоны $E = 0$.

Чтобы получить функцию распределения вероятности с приемлемой точностью, мы проводим вычисления для ансамбля, состоящего из 180 случайных реализаций, который дает нам 4500 уровней. Средняя плотность состояний $\rho(E)$ оказывается практически постоянной в рассматриваемом интервале энергии. На рисунке 1 приведены результаты вычислений $P(s)$ для решетки размером $L = 256$ при степени беспорядка $W = 5$. Чтобы проверить надежность метода, мы сравнили результаты, полученные алгоритмом деления с результатами точной диагонализации с использованием метода Ланцоша. Только три реализации случайного потенциала были рассмотрены. Интервал энергии был достаточно широким. После выпрямления (unfolding) спектра функция распределения $P(s)$ вычислялась в виде гистограмм.

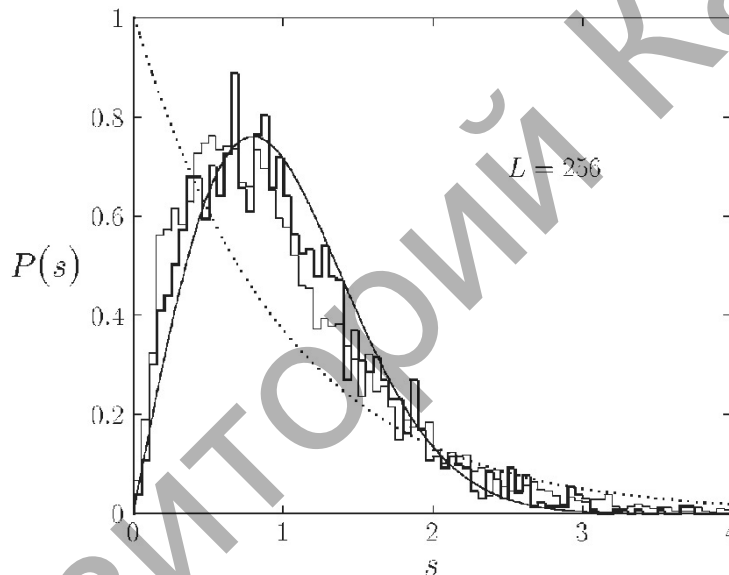


Рис. 1. Распределение расстояний между уровнями энергии $P(s)$ для двумерной решетки размером $L^2 = 256^2$ при степени беспорядка $W = 5$, полученное алгоритмом деления (гистограмма с толстой линией) и точной процедурой Ланцоша (гистограмма с тонкой линией). Распределение Вигнера и Пуассона показаны сплошной и пунктирной гладкими линиями соответственно

Из рисунка 1 видно, что в пределах приемлемых статических ошибок наше приближенное вычисление методом деления хорошо согласуется с результатами точной диагонализации. Наибольшее расхождение наблюдается в областях $s \approx 0,5$ и $s = 1,3$, что, по-видимому, вызвано рассмотрением различных ширин интервалов энергии. Итеративно продолжая процедуру деления, мы достигли рекордных, ранее не встречавшихся в литературе размеров квантовой двумерной решетки $L = 1024$. Для таких «гигантских» размеров решетки метод Ланцоша, в отличие от алгоритма деления, уже не справлялся даже с самыми узкими интервалами энергий за одинаковый период компьютерного времени. Это не удивительно, так как прямая диагонализация имеет дело с матрицами, порядок которых превышает миллион, в то время как алгоритм деления диагонализует матрицы с порядком $m = 1000$.

Полученные результаты показывают, что $P(s)$ для данного конечного размера изменяется от распределения Вигнера $P_w(s)$ к распределению Пуассона $P_p(s)$, если степень беспорядка увеличивается. Кроме того, функция распределения $P(s)$ испытывает непрерывный переход между двумя этими фундаментальными распределениями, когда размер системы увеличивается при фиксированном беспорядке W . Мы демонстрируем, что $P(s)$ хорошо описывается аналитическими $P_w(s)$ и $P_p(s)$ для наименьшего и наибольшего размеров соответственно.

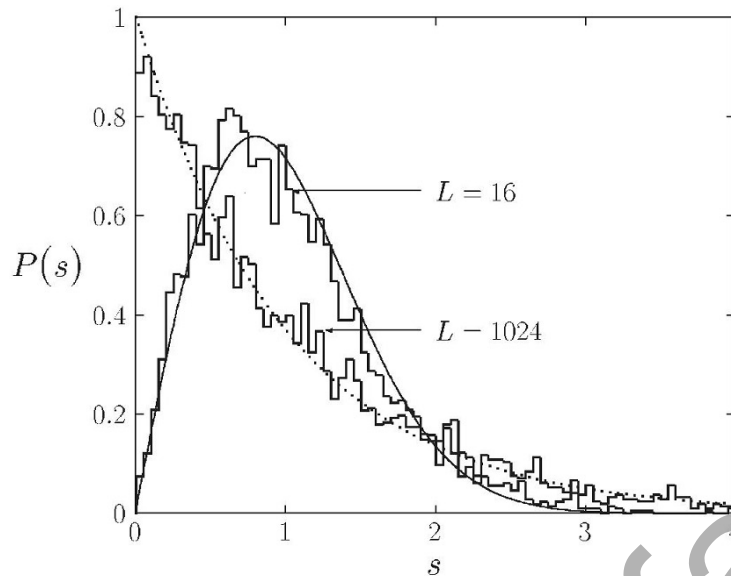


Рис. 2. Распределение $P(s)$ для решетки размером $L^2 = 16^2$ и $L^2 = 1024^2$ при степени беспорядка $W = 6$. (Распределение Вигнера и Пуассона показано сплошной и пунктирной гладкими линиями соответственно.)

В качестве примера на рисунке 2 приведены результаты численного расчета $P(s)$ для этих двух размеров $L = 16$ и 1024 при степени беспорядка $W = 6$. Из метода трансфер-матриц известно, что длина локализации для этого беспорядка равна $\zeta_0 = 37,46$ [7]. Размер системы $L = 1024$ немного превышает длину локализации, что означает полную локализацию всех электронных состояний. Соседние уровни в спектре принадлежат тем локализованным состояниям, которые максимально удалены друг от друга в пространстве, т.е. типичное расстояние между ними соответствует наибольшему масштабу длин L . Так как интегралы перекрытия между состояниями экспоненциально малы, т.е. $\sim \exp(-2L/\zeta)$, уровни энергии нескоррелированы. Поэтому межуровневые интервалы распределены случайно, другими словами, по Пуассону. С другой стороны, последовательные уровни двумерной решетки, которая меньше, чем ζ_0 , соответствуют электронным состояниям со значительным взаимным перекрытием волновых функций. Статистика уровней для такого малого размера описывается теорией случайных матриц. Следовательно, функция $P(s)$ в слаболокализованном режиме стремится к распределению Вигнера. В ортогональном ансамбле, рассматриваемом в данной работе, $P(s)$ ведет себя линейно по s для малых s из-за квантово-механического отталкивания электронных термов.

Автор благодарен В.Краммеру из университета Бремен (Германия) за полезные замечания.

Список литературы

1. Cullum J.K., Willoughby R.K. Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue problems / Ed. Birkhauser. — Boston, 1985. — 355 p.
2. Zharekeshev I.Kh., Kramer B. Advanced Lanczos diagonalization for models of quantum disordered systems // Comp. Phys. Comm. — 1999. — Vol. 121–122. — P. 502–506.
3. Wilson K.G. // Rev. Mod. Phys. — 1979. — Vol. 47. — P. 773–821.
4. Lee P. // Phys. Rev. Lett. — 1979. — Vol. 42. — P. 1492–1496.
5. Aoki H. // J. Phys. — 2004. — Vol. 13. — P. 1492.
6. Wigner E.P. // Ann. Math. — 1957. — Vol. 62. — P. 548–599.
7. Zharekeshev I.Kh., Kramer B. Numerical-scaling study of the statistics of energy levels at the Anderson transition // Statistical and Dynamical Aspects of Mesoscopic Physics / Eds. D.Reguera, G.Platero, L.L.Bonilla, and J.M.Rubi. — Lecture Notes in Physics 547. — Berlin: Springer-Verlag, 2000. — P. 237–251.